

FEALPy 偏微分方程数值解程序设计与实现： 课程简介

魏华祎

weihuayi@xtu.edu.cn

湘潭大学 • 数学与计算科学学院

July 5, 2020

Outline

1 背景和动机

2 课程简介

Outline

1 背景和动机

2 课程简介

偏微分方程数解开源软件

在偏微分方程数值解多年的发展过程中,涌现了很多优秀的开源软件,

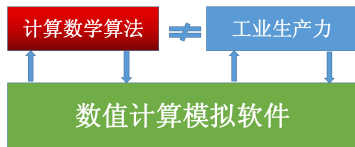
国外:

- FEniCS(C++/Python, 芝加哥大学和查尔姆斯理工大学)
- PETSc (C/Python, 美国阿贡国家实验室)
- deal.II (C++, 德国海德堡大学)
- MFEM (C++, 美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室)
- IFEM (Matlab, 陈龙, 美国加州大学欧文分校)
-

国内:

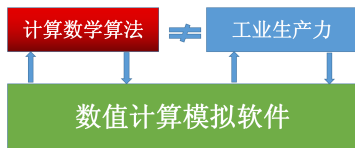
- PHG (C, 张林波, 中国科学院)
- AFEPACK (C++, 李若, 北京大学)
- ???

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



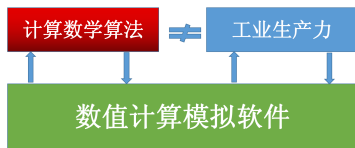
- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



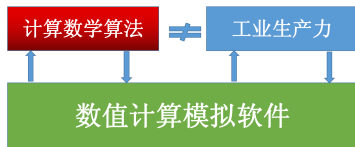
- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



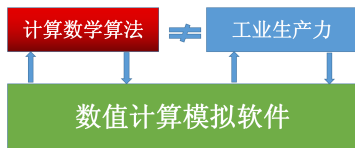
- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



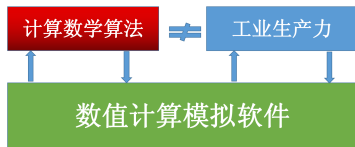
- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

计算数学算法、数值计算模拟软件与工业生产力



- 数值模拟软件是计算数学学科和工业生产的共同**基础设施**。
- 计算数学算法只有通过具体的数值模拟软件才能真正转化为实际的生产力。
- 中国缺少优秀的开源数值模拟软件, 计算数学的算法研究成果很难快速传递到工业应用当中。
- 中国主流商用 CAE 软件大多数来自欧美发达国家, 其在中国的市场占有率高达 97 %, 而且垄断了大部分的核心技术。
- 中国的很多高校还在源源不断为这些国外的商业软件培养用户。

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

自己开发软件的动机

- 想偷懒省事, 不做重复低效的科研工作
- 想培养出能力更全面的学生
- 想有时间陪陪家人和孩子
- 想对数值算法理解更深刻一点
- 想与大牛、小牛们合作, 发更多的 Paper
- 想把计算数学的理论和算法变成真正的生产力

Life is short, you want too much, so you need Python!

优点:

- 支持面向对象编程的脚本语言。
- 优秀的语言设计, 代码可读性强。
- 丰富的科学计算软件包。
- 丰富的非科学计算软件包。
- 开源免费, 应用广泛, 社区庞大。
- 容易扩展。
- 支持并行。

缺点:

- 开发集成环境没有 Matlab 做的那么好。
- 代数解法器实现没有 Matlab 做的好。

Life is short, you want too much, so you need Python!

关于编程语言的补充说明：

- 每种语言都有它的优缺点, 适用的场景也各不相同。
- 每个人最终选择使用什么语言, 是有路径依赖的。
- 大部分人使用一种语言方式, 都远远没有达到这个语言的能力极限。
- 编程的目的是为了操作计算机, 让计算机代替我们来做那些复杂且重复机械的工作, 而不是为了证明哪个语言更好。
- 你和你的代码都需要不断的重构和优化, 才能变的更好、更强大。

Python 的科学计算基础软件包

- **Numpy:** 多维数组及操作. <http://www.numpy.org/>
- **Scipy:** 建立在 Numpy 基础之上的高级科学计算程序库, 如稀疏矩阵, 最优化等. <http://www.scipy.org/>
- **Matplotlib:** 二维与三维作图. <http://matplotlib.org/>

Outline

1 背景和动机

2 课程简介

FEALPy 简介

- 基于 Python 开发, 简单易用, 天然跨平台;
- 对象化设计, 模块化程度高, 各模块之间定义了标准的接口, 易于维护扩展;
- 数组化编程, 自动支持多线程, 代码简短且执行效率高;
- 集成了丰富的网格数据结构类型, 以及常见的网格自适应方法;
- 实现了多种传统和新型的有限元离散方法;
- 提供一维、二维和三维的高阶数值积分公式和积分算法;
- 开源, 免费

<https://github.com/weihuayi/fealpy>

<https://gitlab.com/weihuayi/fealpy>

<https://www.weihuayi.cn/fealpy>

课程内容

本课程主要基于开源偏微分方程数值解软件包 FEALPy, 以案例的方式系统介绍如何快速搭建常用的数值实验程序, 以及 FEALPy 中相关算法的程序设计思想与实现技巧细节。

希望广大科学计算领域的研究者和学生通过本课程的学习, 可以在科学计算研究中基于 FEALPy 方便快速地搭建所需的数值实验程序, **从而提升科研效率**, 做出更多更好的研究成果。

Remark

- 不讲偏微分方程解数值理论的证明和推导, 如解的存在、唯一、正则、稳定、逼近性等。
- 尽量只基于数学分析、高等代数和一些基础计算机知识进行算法实现流程和技巧的讲解。

时间安排

- 2020 年 07 月 06 日 - 2020 年 08 月 02, 共四周, 每周两次课
- 第一次课, 数值实验案例讲解。
- 第二次课, 编程技巧与答疑讨论。
- 每周布置一道上机作业, 每周第二次课上针对作业出现的问题进行答疑。

时间安排

日期	7月6日，周一	7月7日，周二	7月8日，周三	7月9日，周四	7月10日，周五
上课时间	10:10-11:40				10:10-11:40
日期	7月13日，周一	7月14日，周二	7月15日，周三	7月16日，周四	7月17日，周五
上课时间				10:00-11:30	10:00-11:30
日期	7月20日，周一	7月21日，周二	7月22日，周三	7月23日，周四	7月24日，周五
上课时间	10:00-11:30				10:00-11:30
日期	7月27日，周一	7月28日，周二	7月29日，周三	7月30日，周四	7月31日，周五
上课时间	10:00-11:30				10:00-11:30

Figure: 时间安排。

助教信息

- 扈瀚丹 (微信 1 群, 作业发送到 1586756128@qq.com)
- 龚欣 (微信 2 群, 作业发送到 2286070750@qq.com)
- 李奥
- 王鑫
- 曹慧慧
- 李成新
- 陈春雨
- 刘美云
- 田甜
- 王鹏祥
- 王栋

预备知识

- (1) 基本的计算机操作系统基础知识和操作技能, 如 CPU、内存、进程、线程、命令行等。
- (2) 版本控制软件 Git 的基础知识和操作, <https://git-scm.com/book/zh/v2>。
- (3) 数学分析、高等代数及数值计算的基础知识。
- (4) 有限元基础理论和算法。
- (5) Python 科学计算编程基础知识, <https://scipy-lectures.org/>。

课堂与课后要求

- (1) 多读英文文献！硬着头皮也要主动读！
- (2) 多思考
- (3) 多搜索
- (4) 多提问
- (5) 多动手