

▶ 前沿交叉研判



基于数学软件的 前沿交叉研判研究报告

基于数学软件的前沿交叉研判研究 项目组

国家自然科学基金委与中国科学院联合资助

2024

I 目 录

引言	1
第一章 基础数学软件	2
1.1 通用型数学软件	2
1.2 底层数学运算库	2
第二章 数学优化软件	5
2.1 连续优化软件现状	5
2.2 混合整数规划软件	7
2.3 全局优化软件现状	8
2.4 仿真优化软件现状	9
2.5 部分优化行业软件现状	9
2.6 优化建模软件现状	10
2.7 主要差距与原因分析	11
2.8 政策建议	11
第三章 微分方程数值解应用软件	12
3.1 国内外微分方程数值解应用软件的历史和现状	12
3.2 微分方程数值解应用软件的发展趋势和国外成功经验	15
3.3 我国微分方程数值解应用软件面临的问题和发展机遇	16
3.4 发展建议和新的学科增长点	16
第四章 计算几何软件	18
4.1 计算几何相关软件发展历程	18
4.2 发展趋势与面临的问题	20

4.3 政策建议	23
第五章 符号计算软件.....	24
5.1 符号计算及软件概述	24
5.2 通用符号计算系统	24
5.3 符号计算专用系统	24
5.4 自动推理软件系统	25
5.5 面临的问题及对策	26
第六章 统计计算软件.....	27
6.1 统计软件现状和未来	27
6.2 我国的研究基础、特色和优势	28
6.3 新的学科生长点	29
6.4 发展国产统计计算软件的思考	30

引言

随着我国航空、航天、船舶、核工业、军工等领域制造业的加速发展以及工业化进程的持续推进，重大工业软件的自主可控在构建国内国际双循环新发展格局下迫在眉睫，成为重要的“卡脖子”问题之一。如美国商务部于 2020 年 5 月扩充出口管制“实体清单”，国防科技大学、西北工业大学等 13 所中国高校被禁止使用计算机仿真软件 Matlab；2022 年 8 月以“事关国家安全”为理由对涉及设计、物理仿真、制造工艺等的集成电路 EDA 工具链实施出口管制等。许多重大工业软件的核心是数学软件，因此针对数学软件前沿交叉的研究具有重要现实意义。本报告就数学软件的现状、发展趋势、以及我国在该方向上研究基础与条件进行总结和综述、分析和研判新的学科生长点，对我国数学软件发展给出建议。

第一章 基础数学软件

基础类型的数学软件聚焦于科学计算中基本的运算与功能，涉及矩阵运算、数值代数、数值分析、微分方程、数据分析等领域，提供通用的计算接口和编程平台，是各类数学算法和专业软件的基石。

1.1 通用型数学软件

通用型数学软件是集成常见数学领域与各类基础运算功能的综合型软件。该类软件通常具有可视化用户界面，编程环境，同时提供了丰富的内置函数与灵活的扩展接口，因其适用范围广、运行效率较高、使用方便快捷而受到大部分科技工作者的青睐。通过使用通用型数学软件，人们可以迅速将理论成果转化为实际应用，最终形成产品与解决方案。国际上著名的基础数学软件有 MATLAB、Maple、Mathematica、Octave、SciLab、Julia、SageMath 等软件。

MATLAB 是由美国 Mathworks 公司开发的一种通用型数值计算软件，主要用于数值计算、数据分析、信号处理和图像处理等领域。MATLAB 软件编程使用 M 语言，这是一种解释型高级编程语言，类似于 R 语言和 Python 语言。它还提供了丰富的工具箱和应用程序接口（API），包括统计工具箱、信号处理工具箱、图像处理工具箱、控制系统工具箱、优化工具箱等。

MATLAB 的优势在于其强大的矩阵运算能力，其内核使用 C/C++ 语言编写，支持多种数据类型，包括数值、字符、逻辑、结构体、单元和函数句柄等，还支持面向对象编程和函数式编程。它在数据处理方面也同样出色，支持多种数据导入和导出格式，包括 MAT 文件、文本文件、Excel 文件、图像文件等。与此同时，它包含数以千计的工具箱，应用于各类实际领域。

在用户体验方面，MATLAB 的图形界面友好，可以通过可视化界面进行数据分析、绘图和模拟等操作。用户可以通过可视化界面、命令行、或编写自己的函数或脚本轻松完成复杂的计算任务。

在市场应用方面，MATLAB 在同类软件市场占比极大，广泛应用于教育、科研、工程和商业领域。

1.2 底层数学运算库

底层数学运算库是另一类基础数学软件，它们一般不具有集成化的开发环境

和图形界面，而是侧重于数学函数和运算功能的高性能实现。

在底层数学运算库中，数值线性代数软件包是最基础的运算库之一。数值线性代数的四个基本问题是线性方程组、最小二乘、特征值分解和奇异值分解。

运算性能是衡量数值代数软件包的重要指标，需要考虑不同硬件平台，除了单核，还要考虑多核、众核、分布式、GPU、异构等环境，算法实现上还要结合块操作、混合精度等技巧。作为基础数学软件包，还需要针对不同数据类型给出类似的代码实现，常用的有 IEEE 标准的半精度、单精度和双精度的实数和复数等类型。由于历史原因，现有软件包在程序设计语言上有汇编、C/C++、FORTRAN 等区别，近年来也有使用 RUST、Numba、Julia 等更容易编程的语言实现的数值代数软件包。

1.2.1 稠密矩阵数值代数库

稠密矩阵数值代数库主要有 BLAS，LAPACK，OpenBLAS，ATLAS，BLIS，Intel oneMKL，Accelerate.Framework 等。分布式与异构版本的稠密矩阵数值代数库主要有 cuBLAS/cuSOLVER，MAGMA，ScaLAPACK，SLATE。

1.2.2 稀疏矩阵数值代数库

稀疏矩阵数值代数库与稠密矩阵数值代数库不同，它们没有统一的接口标准，其主要原因是稀疏矩阵运算和具体应用高度相关，难以设计出统一的数据结构和最优的数学算法。常见的稀疏矩阵数值代数库有 METIS，SuiteSparse，SuperLU，PARDISO，MUMPS，ARPACK，FEAST，cuSPARSE。

1.2.3 快速傅里叶算法

是数学计算中的基本算法。傅里叶变换的底层算法库主要有 FFTW，heFFTe 和 cuFFT。其中 FFTW 由英文翻译而来，意为“西方最快的傅里叶变换算法库”，该开源软件包使用 C 语言编写，并针对不同处理器架构进行了深度的底层优化。

1.2.4 集成软件包与研发框架

为了研发的便捷性，人们会将不同软件集成到统一的底层框架中，统一数据结构，简化调用流程，进而提高算法开发人员的研发效率。重要的集成化的底层软

件包有 EIGEN, STRUMPACK, Kokkos Kernels, Trilinos, Ginkgo, PETSc 等。

EIGEN 是轻量级 C++ 数值代数模板库。基于 C++ 面向对象机制和模板元编程, 定义了矩阵、数组等数值计算的常用对象, 并实现了基本矩阵运算、数值代数、数值分析中的常用算法。类似的研发框架还有 Armadillo、BLAZE 等。

1.2.5 混合精度软件库

相较于混合精度的算法而言, 混合精度的软件发展较慢。除了求解线性方程组的混合精度算法之外, 大多数基本问题的混合精度算法依旧停留在理论和数值实验阶段, 并没有成熟的软件实现收录于类似于 LAPACK 的数学库中。

在大规模稀疏矩阵计算方面, 混合精度相关的数学库主要有 SuperLU、STRUMPACK、Trilinos、Ginkgo、PETSc 等。

另外, 作为分布式编程事实上的通讯标准, MPI 正在开发支持不同精度通讯及归约操作的函数, 尽管尚处于初级阶段, 但对充分大的数据量已显现了性能优势, 今后必定会实现更多支持混合数据类型的底层通讯函数。

第二章 数学优化软件

数学优化是应用数学的重要组成部分，也是当前机器学习、人工智能的基础之一。

2.1 连续优化软件现状

连续优化问题可分为线性锥规划、非线性规划、张量与多项式优化、流形优化、稀疏优化、变分不等式与互补以及无导数优化等。

2.1.1 线性锥规划

线性锥优化是指决策变量取自锥、约束和目标函数为决策变量线性函数的优化问题。线性锥规划问题在规模上呈现出持续增长的趋势。一般来说，可计算的线性锥约束优化问题涵盖了线性规划、二阶锥规划和半定规划三类。

半定规划是应用广泛的线性锥约束优化问题。相应算法主要集中在内点法。当前，商业优化软件 COPT, MOSEK, MindOpt 等已经集成了半定规划的求解功能，也有几十种学术软件或是开源代码可供使用，它们主要以内点算法为基础，其中最为知名的 SDPT3 和 SeDuMi，它们同 MOSEK 一起成为了著名的凸优化建模系统 CVX 所支持的三大半定规划求解软件包。目前国产求解器 COPT 性能与 ASP 平台测试的 SDP 软件相比，处于领先地位。

2.1.2 非线性规划

非线性规划是指约束或者目标函数是线性函数的优化问题，它是计算数学的核心组成部分之一。

二次规划作为非线性规划中最主要的数学规划问题之一，受到了广泛的重视。基于积极集法，Fletcher 研发了求解二次规划的算法包 BQPD, QPOPT, Mosek。Xpress 是国际三大商业优化求解器之一，该求解器能求解数百万决策变量的二次规划和二阶锥规划，并应用于更为一般的二次约束二次规划和非线性规划。对于稀疏二次规划问题，软件包 SQOPT 能基于稀疏结构高效求解大规模的等式和不等式约束的凸二次规划。

一般非线性规划软件包括 DONLP2, LINGO, NPSOL, GRG2。

对于大规模非线性规划问题，典型的软件包有：Artelys Knitro, LANCELOT，

CONOPT,SNOPT。

2.1.3 张量优化

张量优化是以张量作为变量，以张量分析作为基本研究工具的优化问题领域，多项式优化则专注于探索目标函数具有多项式结构的优化问题。对于多项式优化，SOS 多项式是多项式优化理论与算法的基础，迄今为止 SOS 多项式的仍然是一个活跃的研究方向。

张量优化的软件包，代表性的有 MATLAB 中 Tensor Toolbox 与 Tensorlab。近几年来，随着人工智能与大数据技术的兴起，诞生了用于处理张量方法和深度神经网络的优化软件 TensorLy。

对于多项式优化的软件包，最著名的 SOSTOOLS。中国科学院的王杰基于 Julia 语言开发了 TSSOS, SONCSOCP, SparseJSR 与 NCTSSOS 等多款开源软件，用于求解稀疏多项式优化问题。

2.1.4 流形优化

流形上的优化是指约束集合为光滑流形的一类优化问题，它在计算科学、统计学、机器学习、数据科学和材料科学等领域中有着重要的应用。与线性规划、非线性规划等相比，流形优化的历史较短，但近十年来也不断有相应的流形优化求解软件发布。

针对 Stiefel 流形上的优化问题，主要软件包有 OptM 和 STOP。Riemannian 及一般流形上的优化的软件包有 ROPTLIB, ARNT, CDOp, Manopt, RSOpt, ManPG, AManPG; almssn 等。

2.1.5 变分不等式与互补问题

变分不等式问题是在博弈论、交通网络等中大量出现。变分不等式的求解包括基于子空间投影与临近点类算法等多类方法。投影法中最为经典的方法外梯度投影法与投影-收缩算法。

互补问题作为变分不等式的一个重要分支，对于其求解算法的研究自然也是研究的重点，其求解软件相比一般化的变分不等式问题的求解软件更加丰富与全面。虽然目前互补问题的求解方法很多，但现有的算法包较为分散，集成程度欠缺，

并不利于实际的调用。

2.1.6 稀疏优化

近年来,针对稀疏优化软件与算法包的研究越来越受到学者们的关注,现已成为数据科学与优化领域中最为活跃的课题之一。

在稀疏优化问题算法设计中,融入必要的二阶信息能够加速算法。其中较为代表性的软件基于临近点/增广朗日方法和半光滑牛顿法的 SuitLasso。

2.1.7 无导数优化

在实际应用中,许多优化问题的目标函数是没有显式表达式的黑箱,其函数值由实际的物理实验或者大量计算机模拟得到,其一阶信息不可获得、不可信或是难以实际地观察到。无导数方法主要可以分为直接搜索方法和基于模型的方法,两种方法都有局部和全局的形式。除此之外,在求全局形式下还有一些随机方法。

直接搜索算法代表性的软件包括: FMINSEARCH 和 NOMAD。

基于模型的方法代表性的算法有 Powell 的 NEWUOA 系列方法和 Kelley 的 Implicit Filtering 等。代表性的软件包括:BOBYQA, IMFIL, SID-PSM, SNOBFIT 等。

2.2 混合整数规划软件

混合整数规划问题是指既含有连续变量又含有整数变量的优化问题。

2.2.1 混合整数线性规划

一般混合整数线性规划问题的求解器有 CPLEX, GUROBI。GUROBI 在全球最著名的专业求解器评比网 Decision Tree for Optimization Software 中的混合整数线性规划中排名第一,展现出更高的求解速度与精度,该求解器能在 4 小时内 240 个测试算例中求解 227 个算例。此外,由我国杉数科技自主研发的 COPT, 阿里巴巴达摩院研发的决策优化软件 MindOpt 等商业求解器也为国内较为优秀的混合整数线性规划商业求解器,该两个求解器在上述求解器专业评比网中均排名前列,求解问题数分别达到了 204 和 195 个算例,这意味着国内自主研发的混合整数线性规划求解器已经达到世界顶尖水平。

2.2.2 混合整数二次规划

混合整数二次规划问题在投资组合领域有着重要的应用。混合整数二次规划问题是 NP-难的。目前，BARON、SCIP 和 GUROBI 等求解器都可以求解非凸的混合整数二次规划问题。目前在专业求解器评比网上的表格显示，求解混合整数凸二次规划问题中，国际的求解器有 Gurobi、SHOT、OCTERACT、BARON、MOSEK、KNITRO、SCIP、MNTAUR、BONMIN，国内的求解器是 COPT 性能第一，且 Gurobi 是 COPT 的 1.04 倍，已达到国际领先水平。但是离散的非凸二次规划问题的全局求解器尚未由国内的求解器公布。

2.2.3 混合整数二阶锥规划

混合整数二阶锥规划的目标函数是线性的，约束函数是一个二阶锥，其变量包含整数变量。它的应用十分广泛，包括期权定价，网络设计和操作等。其求解方法主要分为两类，一类由混合整数规划的求解技术发展而来，另一类则是特殊化了一般的混合整数非线性规划问题求解方法。目前在专业求解器评比网上的表格显示，国际的求解器有 Gurobi、Xpress、SCIP，国内的求解器是 COPT 性能比 Gurobi 仅慢 2.13 倍，高于 Xpress，已达到国际一流水平。

2.2.4 混合整数非线性规划

混合整数非线性规划不仅需要处理整数变量带来的挑战，也要解决非线性函数带来的难题。因此，混合整数非线性求解器非常复杂，往往建立在混合整数规划求解器与非线性规划求解器的基础上。

SCICONIC 是最早的商用混合整数非线性规划求解器之一。

在专业求解器评比网上，国际求解器有 ANTIGONE、BARON、COUENNE、LINDO、OCTERACT、SCIP，尚未有国内求解器发布。

2.3 全局优化软件现状

目前，全球现有的全局优化问题求解软件，主要有三种，分别是 Baron、SCIP、Maple 全局优化工具箱。

2.3.1 商业化的全局优化求解器 Baron

Baron 求解器是一种用于求解非线性优化问题的软件工具。总部位于美国的公司 Baron Optimization Inc. 开发。

2.3.2 开源的全局优化求解器 SCIP

SCIP 是一种强大的求解约束整数规划问题的软件套件。作为一个开源的求解器，它提供了一套灵活的功能和算法来解决各种形式的约束整数规划问题。它包括线性规划、混合整数线性规划、混合整数非线性规划、混合整数非线性可行性问题等数学规划问题。

2.3.3 Maple 全局优化工具箱

Maple 全局优化工具箱内置的优化算法来自于 Optimus 软件，由全球领先的优化技术开发商 Noesis Solutions 提供。使用全局优化工具箱，用户可以在强大的 Maple 数值和符号系统中建立优化模型，利用高级优化算法得到鲁棒的、高效的结果。

2.4 仿真优化软件现状

针对大规模复杂系统的优化，仿真是一个有力的工具。仿真优化是指基于仿真模型的评估结果，运用优化算法来寻找最优解的优化方法。仿真优化在运筹优化问题中应用广泛。仿真优化软件所内含的优化器不同主要有 OptQuest, SimRunner, GoldSim Optimizer, Plant Simulation Optimizer, Global Optimization toolbox。

一些开源的针对仿真优化问题的优化器主要有 SimOpt, 贝叶斯优化器（如：DiceOptim, DACE, GPyOpt, Metrics Optimization Engine, Spearmint 等），Industrial Strength COMPASS, PyMOSO, Nevergrad, PDFO,

一些仿真优化软件（如 AnyLogic）正在积极拥抱人工智能科学技术，计划推出充分利用人工智能技术的仿真优化软件新产品。

2.5 部分优化行业软件现状

2.5.1 机器人和智能驾驶中的优化方法与软件

机器人和自动驾驶系统对优化计算的需求非常高，这是因为它们需要在复杂

和动态的环境中进行实时决策和控制。机器人和智能驾驶行业对优化计算的一些典型需求有路径规划、轨迹优化、实时决策制定、控制系统等。

2.5.2 大规模集成电路设计中的优化方法与软件

大规模集成电路设计与仿真是电子设计自动化(EDA)领域最具挑战性的典型问题,从版图规划、布局布线到仿真验证的各个环节,数学优化模型、算法与软件始终扮演着重要角色。

在EDA领域中存在很多专门化的商业软件,如Protel, Altium Designer, Cadence Allegro, Kicad, OrCAD, EWB等;在国际范围内, Synopsys、Cadence 和 Siemens 三家公司几乎垄断了 EDA 商业软件市场。

2.5.3 航空制造中的优化方法与软件

制造业是立国之本、强国之基,“推进新型工业化,加快建设制造强国、质量强国、航天强国、交通强国、网络强国、数字中国”是我国制造业转型的要求。在制造业中,存在大量应用场景需要使用各种优化算法和软件。

2.5.4 经济金融领域中的优化方法与软件

经济金融领域的很多实际问题均是天然的优化问题,如企业的生产规划,基金公司的资产最优配置等。经济金融领域对优化算法与软件的需求包括几个方面:(1)资源配置优化:(2)企业生产规划:(3)资产配置优化:(4)指数追踪和增强。

2.6 优化建模软件现状

数学优化的建模语言(Algebraic modeling languages, AML)是高级计算机编程语言,是用于描述和求解大规模数学计算的优化问题。GAMS 和 AMPL 是最为常用的两种语言之一,它们被广泛应用于学术界和工业界。

除了 AMPL 和 GAMS,还有许多建模语言在学术界和工业界中得到广泛使用。有些建模语言依靠着广泛通用的计算软件而被人选择并使用,例如 Pyomo、PuLP、YALMIP 和 SAS/OR。利用 Python 的广泛应用和强大的生态系统,Pyomo 和 PuLP 得到了广泛关注,成为了许多人的选择。

2.7 主要差距与原因分析

我国在数学优化软件的研发与国际领先水平还有不小的差距，多个领域缺乏自主产权的优化软件。其主要原因一是我国对于数值计算和软件开发的起步较晚，将相关的理论成果转化为实际的软件包需要时间和资源；二是优化软件包的开发需要大量的人力、财力和时间投入，我国在上个世纪面临着资金、专业开发人员、计算资源限制等问题，导致软件包的开发进展较慢。

2.8 政策建议

- （1）基金委或科技部设立优化软件相关的重大或重点项目。
- （2）加大国内优化软件开源社区的发展力度。
- （3）跨领域整合人才资源，成立优化软件相关的学会或协会。
- （4）社会和学术机构进一步加强对优化软件成果的认定和支持。
- （5）以开放心态积极引入国外资源，推进国内外合作共同开发优化软件。
- （6）加大力度培养专门的优化软件人才，以满足日益的技术需求。

第三章 微分方程数值解应用软件

微分方程数值解应用软件作为一种强有力的仿真模拟工具，能够帮助工程师们通过计算的手段高效解决和分析各种复杂的科学和工程问题，在科学研究和工程应用中发挥重大作用。

国内外微分方程数值解应用软件的发展情况存在显著差异。国外微分方程数值解应用软件的发展体现了行业对高度集成、多功能和广泛应用的不断追求，也突显了大型软件公司在推进这一领域技术创新和市场发展方面的关键作用，国内偏微分方程数值解应用软件技术水平及集成程度相对较低、自主化水平有待提升以及市场份额相对较小。我国在微分方程数值解应用软件的基础数学理论、人才储备、研究机构和政策支持等方面都有一定的条件，抓住发展契机和增长趋势，有望实现我国微分方程数值解应用软件跨越式发展。

3.1 国内外微分方程数值解应用软件的历史和现状

国外微分方程数值解应用软件相对国内应用软件在技术、市场占有率以及生态建设方面具有压倒性优势。

3.1.1 偏微分方程数值解应用软件

偏微分方程数值解应用软件在工程和物理学界有着深远的应用价值。

航空航天工程的计算机辅助工程（CAE）软件可以说是偏微分方程数值解应用软件的鼻祖。CAE 软件已经渗透到更多的应用场景中，包括集成电路等其他工程领域，发展出其他一些偏微分方程数值解应用软件，例如半导体工艺和器件仿真软件 TCAD（Technology Computer Aided Design）。

CAE 软件的历史发展可以追溯到 20 世纪 60 年代和 70 年代。最初的 CAE 软件的发展主要是由航空航天、核电等高技术产业的需求推动的。随着计算机技术的发展，CAE 软件的功能和应用范围不断扩大。之后，更多 CAE 软件公司涌现，如 Fluent、CD-adapco、COMSOL、Altair 等。这些公司的软件主要用于计算流体力学、热分析、电磁场分析等领域。在本世纪初，CAE 软件的应用范围进一步扩大。一些大型软件公司也开始进入 CAE 市场，如 Siemens、Dassault、PTC 等。这些公司的软件不仅包括 CAE 功能，还包括 CAD、CAM 等功能，形成了完整的产品生命周期管理解决方案。

随着半导体技术和集成电路的快速发展，TCAD 软件应运而生。TCAD 软件是一种用于模拟半导体处理和器件操作的 CAE 软件，它为半导体设计和制造提供了一个强大的计算工具。

随着半导体工艺的不断缩小和设计复杂性的增加，TCAD 软件开始向更加集成化和自动化的方向发展。TCAD 软件不仅可以进行器件模拟和工艺优化，还可以直接与电子设计自动化工具链相结合，实现从器件模拟到电路设计的完整流程自动化。

新材料和新器件的涌现已经超越了传统 TCAD 的能力范畴。当器件到达深纳米尺度甚至原子尺度时，量子效应起重要作用，此时主要的困难有：传统的模型没有完备地包含量子效应；通过实验手段获得可靠的参数变得越来越困难和费时费力；诸多新型电子器件和电子材料的不断问世，也完全超出了传统 TCAD 方法的应用范畴。TCAD 软件也相应增加了量子效应的功能。

国外 CAE 软件经历了从单一领域到多领域、从小型公司到大型软件公司的演变过程。

国外 CAE 软件的发展不仅体现了行业对高度集成、多功能和广泛应用的不斷追求，也突显了大型软件公司在推进这一领域技术创新和市场发展方面的关键作用。这些因素共同推动了 CAE 软件成为现代工程设计和分析中不可或缺的工具。

国内 CAE 软件开发起步并不晚，基本上从 1970 年代就开始有专业程序的研制。近年，随着国家发展需要，一批国产 CAE 公司已经成长起来。

中国的 CAE 软件经历了从无到有、从小到大的发展过程，已经成为一个拥有一定规模和实力的产业。国内存在的主要问题包括技术领先性不足、工具集成程度相对较低、自主化水平有待提升以及市场份额相对较小。

3.1.2 常微分方程数值解应用软件

上世纪 70 年代，ODE 数值解应用软件开始出现，如 MATLAB 和 Mathematica 提供了一系列的工具箱用于求解 ODE 问题。其他 ODE 的国际软件有 LSODE，ODEPACK，DASSL，SCIPY 等。

电子设计自动化（EDA）软件的核心是 SPICE。SPICE 通过求解超大规模的微分代数方程组对模拟电子电路进行仿真。SPICE 用于在集成电路和板级设计中被

用来检查电路设计的完整性并预测电路行为。

SPICE 的第一个商业版本是 ISPICE。其他著名的 SPICE 商业版本有 ISPICE, HSPICE, PSpice 和 SPECTRE。

分子动力学 (MD) 模拟软件起源于上世纪 60 年代, 用于模拟分子间的相互作用和运动。随着计算能力的提升和理论的发展, MD 模拟软件得到了广泛应用, 尤其在物理、化学和生物学领域。

AMBER 是一个流行的分子动力学模拟软件, 由美国加州大学旧金山分校的 Peter Kollman 教授于 1980 年代初推出。

GROMACS 是荷兰 Groningen 大学 1990 年代初开发的另一个著名 MD 模拟软件。

近年来, 随着硬件性能的提升和算法的优化, MD 模拟软件得到了巨大的发展, 可以模拟更大、更复杂的体系, 并获得更加精确的预测结果。AMBER 和 GROMACS 等软件也不断推出新版本, 增加新功能。其他流行的 MD 软件有 NAMD, LAMMPS, CHARMM, PL_Poly, Desmond。

电子设计自动化 (EDA) 软件的核心工具 SPICE 在国外的发展历程不仅反映了计算技术的日益成熟, 也体现了工程和科学研究领域对更先进工具的持续需求。

同样地, ODE 数值解应用软件也正在朝着更高效、更灵活、更用户友好以及更集成化的方向发展。

国内 ODE 软件主要以研究院所和高校研发团队为主导。例如, 北太天元数值计算通用软件是由北京大学重庆大数据研究院基础软件科学研究中心——数值计算实验室独立自主研发的国产通用型科学计算软件; 北太天元提供 ODE 求解器函数有 ode23、ode45、ode78、ode89、ode113 等, 提供 dde23、ddesd 和 ddensd 等函数来求解时滞微分方程。

MWORKS 是由同元软控公司为满足国内工程师和科学家的需求而开发的。

ALPS 是由华大九天公司开发的 SPICE 仿真工具。

概伦电子是我国本土 EDA 老厂商之一, 也是目前我国本土 EDA 领先企业之一。

国内 ODE 数值解应用软件的发展可视为一条从起步到逐渐成熟的路线。国内 ODE 数值解应用软件在自主化程度上也取得了一定的进展。

总体而言, 国内 ODE 数值解应用软件虽然在工具完善度、自主化程度和市场

占有率方面还存在一定差距，但也逐渐展现出不容忽视的发展潜力。

3.1.3 微分方程数值解应用软件的开发平台

随着实际问题的微分方程模型复杂性日益增长，专为微分方程数值解设计的开发平台成为迫切需求。

国外的重要开发平台有 MFEM, FreeFEM, Deall.II, Firedrake, FEniCS, OpenFOAM 等。

国内的开发平台有 FEPG, AFEPack, JASMIN, PHG 等。

微分方程数值解开发平台提供丰富的数值算法和工具，支持多物理场和多种微分方程的求解。

3.2 微分方程数值解应用软件的发展趋势和国外成功经验

微分方程数值解应用软件集数学、计算机科学和工程应用于一体，是数学模型和数值方法的信息化表示，其核心在于底层面来探讨微分方程数值解应用软件的发展概况。

3.2.1 发展趋势

CAX 一体化方法

三维复杂几何区域上偏微分方程的高阶数值方法和高质量网格生成一直是基础工业软件的瓶颈问题。CAX 一体化技术路径逐步成为关注焦点。欧美等发达国家已经开始布局研制 CAX 一体化研究，以期在工业软件领域继续形成代际领先优势。

软件云化

随着云计算和大数据技术的不断发展，应用软件的计算能力和数据处理能力也在不断提高。基于云的 CAE 软件越来越受到重视。

应用平台化

国外并购来扩大市场份额和提高竞争力，产品“多点开花”，产品体系矩阵化。我国 CAE 软件的应用领域也在不断扩大，涉及到了航空、航天、汽车、机械、电子、建筑等多个领域。

3.2.2 国外成功经验

一是注重技术创新，不断推出新的算法、模型和工具，以满足不同领域的需求。二是并购整合倾向于收购专业技术领域的服务商。三是重视企业与高校科研院所的合作。

3.3 我国微分方程数值解应用软件面临的问题和发展机遇

3.3.1 国内面临的问题

- 一是产学研生态体系不完善。
- 二是产业化程度落后与技术积累不够。
- 三是知识产权保护落实不到位。

3.3.2 国内软件的发展机遇

- 一是欧美对我国“卡脖子”导致“国产替代”成为“刚需”。
- 二是技术路线转折点是新的契机。抓住这一契机，有望实现我国工业软件跨越式发展，类似我国汽车行业从“汽油发动机落后”到“电动车同步发展”的跨越。
- 三是开放合作生态逐渐成形。随着全球化和信息化的趋势，我国工业软件开放合作成为主流，企业之间的合作和交流越来越频繁，共同推动着软件产业的发展。

3.4 发展建议和新的学科增长点

3.4.1 学科增长点

可计算建模

微分方程数值解应用软件是数学方法和理论的数字化表达，数学模型是微分方程数值解应用软件的生命力所在。

结合机器学习生成对世界因果的理解，越来越多地引起关注。新的建模方法将领域知识、对称性和不变性等规则或方程整合到 AI 系统，这种整合可以通过数据增强、深度学习系统设计、潜在力模型、架构特征、损失函数和量化性能提升等方式实现。

新型计算方法

当前大部分的微分方程数值方法都是基于贴体网格的方法，但复杂几何区域

上高质量网格生成困难制约着仿真精度和效率的进一步提升。**CAX 一体化计算方法**将 CAD 建模与 CAE 仿真一起考虑，实现网格自动生成且满足任意精度，需要发展全新的计算方法和数学理论。

神经网络在图像处理方面的突出优势，已经证明了它在求解高维问题方面的强大能力。利用**人工智能技术解偏微分方程**，特别是高维问题，相关算法和理论研究。

异构并行是当前计算硬件发展趋势之一，特别是国产计算机体系结构呈现多样性。大型复杂工程问题处理技术和软件计算能力严重不足，算法并行可扩展性差，难以与国产大型计算机有机结合。**适配国产异构系统的异构并行算法研究**是一个重要的研究方向。

软件实现技术

云原生技术作为一种先进的软件开发和部署方式，致力于解决传统应用软件开发与云计算融合的诸多挑战。在数智时代的背景下，云原生技术以其轻量级和高度可扩展的特性，成为应用软件企业实现快速创新和应对市场竞争的有效手段。

随着云原生技术的发展，**低代码开发平台**应运而生，为开发人员提供了更简洁、高效的开发模式。低代码开发平台旨在通过可视化开发和拖放操作，降低开发复杂性，加速项目交付。

3.4.2 发展建议

建议 1：强化人才队伍建设，进行长周期支持，组建符合中国国情的建制化研究团队。

建议 2：重视产学研生态建设，贯穿工业软件基础研究与工程应用。

第四章 计算几何软件

4.1 计算几何相关软件发展历程

4.1.1 CAD/CAM 软件

上世纪六十年代，世界上第一款 CAD 软件 Sketchpad 诞生于麻省理工学院，这是设计人员以电脑屏幕绘图方式与计算机进行交互的革命性进步。

由于早期计算机的高成本以及飞机和汽车独特的机械工程要求，大型航空航天和汽车企业成为 CAD 软件最早的商业用户，许多公司也自行开发了专用 CAD 软件，包括汽车制造商如福特(PDGS)、通用汽车(CADANCE)、梅赛德斯-奔驰(SYRGO)、日产(CAD-I)和丰田(TINCA 及 CADETT)和航空航天制造商如洛克希德(CADAM)，麦道(CADD)和诺斯罗普(NCAD)都有大型的内部软件开发团队致力于开发专用 CAD 程序。1975 年，法国航空航天公司达索开发了 CATIA 3D CAD 软件程序，该软件一路发展成为目前最成功的商业 CAD 软件。

上世纪七十年代，以边界表示(B-rep)与构造实体几何(CSG)为基础的建模系统相继从剑桥大学与斯坦福大学发布。此后，世界最知名的商业几何引擎 Parasolid 与 ACIS 相继诞生于剑桥大学 CAD 实验室。几何引擎是 CAD、CAE、CAM 软件所共同依赖的重要基础软件。Parasolid 和 ACIS 已成为国际上主流 CAD 软件使用最广泛的几何引擎。Parasolid 后被融入美国的 UG 软件中，成为一个实体和曲面造型通用几何平台。ACIS 后被达索收购。

上世纪八十年代，波音、通用电气和美国国家标准与技术研究院发布了通用 CAD 数据转换格式 IGES，实现了复杂三维曲线和曲面在不同 CAD 软件程序之间的转换。IGES 是当今 CAD 软件中使用最广泛的数据转换格式。

由于 CAM 与 CAD 紧密联系，CAM 软件也经常作为 CAD 软件中集成的功能出现。自上世纪 90 年代以来，全球范围内已经涌现出许多功能强大的 CAD/CAM 软件，目前广泛使用的有：Unigraphics NX，CATIA，MASTERCAM，CIMATRON，SolidWorks，PowerMill 等。

我国早期的 CAD 系统开发与应用的进程几乎与国际同步。

但与国外著名 CAD 软件如 CATIA 及 UG 相比，国内 CAD 软件无论在功能与技术成熟度上都有较大的差距。特别是,缺乏自主可控的几何内核以及一些核心几

何建模与计算技术是我国 CAD 软件落后的主要原因,产业生态也是其原因之一。

4.1.2 网格生成软件

自上世纪 80 年代以来已产生了一系列成熟的网格生成软件,这些软件已融入到工业设计仿真流程中。大多数网格生成软件都与航空、军工等产业的发展密不可分。1996 年开始,欧盟、以色列等国家或地区设立多个项目基金自主开发包含网格生成在内的 CGAL 图形库;ANSYS 于 2000 年收购 ICEM CFD 网格软件,并融入至 ANSYS 工作流中,现为顶尖工业软件公司之一。

目前,国外网格生成软件分为商业软件与免费/开源软件。其中网格商业软件大多集成于 CAE 软件中,如 ANSYS 软件包包含 ICEM CFD、Meshing 等网格软件。其它为单独的网格软件,如 Pointwise。免费/开源软件大多由国家、实验室支持赞助。如 MeshLab 由意大利 ISTI-CNR 的视觉计算实验室开发;Gmsh 受到欧盟、美国等多个地区组织的资金技术支撑;CGAL 由欧盟、以色列多个项目基金资助开发;Open CAX (包括 BRL-CAD, Free CAD 等)由美国军方项目脱胎而来,现为非盈利组织但依然为美国军方服务。

国内网格生成软件的研制起步较晚,目前由国内机构研发的网格生成软件系统主要包括:浙江大学研发的 HEPD/Pre、中国空气动力研究与发展中心研发的 NNW-GridStar、山东大学研发的 AUTOMESH-2D、大连理工大学研发的 JIFEX 软件前处理子系统 Auto FEM 以及中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心研发的 SuperMesh 等。从整体技术和软件市场份额而言,国内网格生成软件同国外网格生成软件相比还有很大的差距与不足,国内还缺乏通用的网格生成软件,大多相关从业人员还是使用国外开源或商业软件。

迄今为止,无论国外还是国内,网格生成软件依然存在居多缺陷与挑战。

4.1.3 等几何分析软件

CAE 仿真软件自上世纪六十年代以来得到快速发展,涌现了一批优秀的仿真软件如 ANSYS,LS DYNA 等。这些软件通常都是通过不断并购而做大做强,并且融合了 CAD,网格生成,CAE,CAM 多个软件系统。

等几何分析是有限元方法的扩展。但由于等几何分析的概念提出较晚,所以其

商业化还处于起步阶段，目前市场上比较有代表性的 IGA 公司有 Boeing、LS DYNA、CoreForm 等。Boeing 使用 IGA 软件带来了以下几点优势：首先使用 IGA 方法可以精确计算形状灵敏度，并且精度高于 10 位有效数字；其次，在几何模型的参数空间上仿真计算可以帮助克服许多计算上的障碍。Coreform IGA 是一个可以直接在点阵结构，CAD 模型和 stl 文件上运行的求解器，这使得它与需要对几何形状网格化的传统有限元方法相比效率有很大的提升。Coreform Cubit 可以将 CAD 模型转化为高质量的六面体网格，很大程度上减少了在 FEA 和 CFD 模型准备上花费的时间，同时最大程度上控制了网格的质量，从而大大提升了计算效率。

IGA 是实现 CAD/CAE 一体化的有前景的方向之一。目前我国 IGA 方面的研究仍然局限在高校方面，迄今还没有系统开发 IGA 的软件团队与公司。2022 年，科技部布置了基于等几何分析的理论、算法与软件开发的重点研发计划，但总体投入比较少。总体说来，国内 IGA 软件的研发起步较晚，我国无论在基础研发、人才队伍、软件开发都与国外有较大差距。为弥补我国在工业软件上与国外的差距，摆脱国内相关企业对国外工业软件的依赖，必须要对 IGA 软件引起足够的重视。

4.2 发展趋势与面临的问题

4.2.1 发展趋势

政策趋势

目前，仅美国的 Autodesk、PTC，法国的 Dassault 和德国的 SIEMENS 四家公司就几乎占据了 CAD/CAM 市场 90% 以上的份额。美国政府对工业软件的发展高度重视，使其工业软件市场发展始终具有着充足的动力。欧洲国家的大型工业软件企业在其工业软件行业的发展中也起到了主导作用。法国 Dassault 公司就占据了其国内超过 20% 的市场份额，影响着法国整个工业软件行业的发展。同时，大型工业企划的推动作用在法国也比较明显。

中国的 CAD/CAM 软件从“七五”到“十五”期间，受到国家机械部（机电部）的“CAD 攻关项目”、国家科委（科技部）的“863/CIMS、制造业信息化工程”对于国产自主工业软件扶持，先后出现了高华、数码大方、浙大大天等一批二维 CAD 软件公司；之后，北航的 PANDACAD，中望的 ZWCAD 等三维 CAD 软件也逐渐问世。虽然这些公司或高校已经具备一些自主研发能力，但其三维产品往往还是机理

简单，功能单一，一个重要的原因是三维 CAD 软件技术门槛较高，需要基础科学的高端人才的长期投入。与此同时，中国制造开始进入越来越需要高端软件设计能力的时期，国内处于萌芽状态的三维 CAD 软件被国外软件抢占市场。从“十一五”期间开始，随着科技部和工信部项目任务的重组，国家补贴的大量资金被用于购买国外软件，国家对于三维 CAD 软件的研发资金投入强度逐渐变小，远不能满足追赶国外软件的需要。

尽管我们涌现出一批工业软件公司，但是只有少数的大型软件企业被认可，大部分中小型企业经营困难。主要原因是政策支持不够聚焦，针对性政策偏弱，导致校企联动缺乏支撑，降低了科技成果的转化率。另一方面，工业软件与工业企业应用耦合度高，但是针对鼓励工业企业支持国产工业软件的政策较少，国内软件的供应率不够高，导致工业软件企业的利润率很低，没有足够资金的支持，也间接导致了技术型人才的缺失。所以国家对工业软件发展的资金，技术，人才的持续支持以及鼓励工业企业投入到工业软件中是我国工业软件持续稳定发展的保障。

技术趋势及学科增长点

现有 CAD 造型系统仍有很多技术上的缺陷，例如，一些重要的几何操作包括求交、光顺、倒角等仍富有挑战性；常用的 Brep 裁剪表示下的 CAD 模型通常不水密；CAD 的 Brep 边界表示到体表示的转换困难；CAD 软件缺乏系统性的严格误差控制方法。此外，CAD 造型方法只表示模型的几何信息，而缺乏物理信息的表达，也不方便表示微观结构等复杂几何模型。因此，CAD 软件的未来技术趋势将倾向于表示简洁、交互方便的造型方式，通过新型样条等先进数学理论解决模型水密性和与体表示问题，提升 CAD 表示的局部加细能力，并且为了后续仿真分析的需要，在几何表示的同时加入对密度、温度等物理属性的表示。

传统上,CAD 与 CAE 分属不同的学科领域，各自独立发展。相应地，CAD 与 CAE 软件也各自独立研发。但 CAD 与 CAE 是设计与仿真这一条线上的前后两端，而两者的几何数据表示不同，导致 CAD 到 CAE 的数据转换效率低下。随着未来环境对航空装备性能、研制周期等的要求越来越高，在装备设计阶段尽早引入仿真分析，可对装备性能进行充分的仿真和优化，并有效加速设计迭代，在此过程中的关键因素就是设计/仿真所需 CAD/CAE 软件的一体化。

其次是高性能计算环境的部署。为了适应快速发展的高性能计算硬件环境，

CAD/CAE/CAM 软件需要不断吸收高精度、高效率并行数值算法，进行软件的并行化升级，并面向高性能计算环境进行软件适应性改造，为超大规模的高效、高精度仿真奠定基础。

此外，云计算已经是 CAD/CAE/CAM 软件未来的趋势。互联网行业快速发展催生了许多新技术，将这些新技术与工业软件行业结合起来是大势所趋。如云计算服务技术已经成熟，能够实现 CAD 设计及 CAE 仿真求解的过程，用户可通过上传计算文件、选择求解器等利用云计算平台辅助产品设计。

4.2.2 面临的问题

人才培养难题

计算几何密切相关的 CAX 软件所属行业属于知识、技术密集型行业，研发人员需要掌握几何学、代数、拓扑学、数学建模、数值计算等理论基础知识和丰富的软件工程经验，人才培养需要较长的周期和相应的环境。现有复合型高端人才数量难以满足行业内日益增长的人才需求，制约了行业的快速发展。

高等院校未设置计算几何相关专业方向，成熟的复合型人才培养方案及课程配置比较缺乏，围绕 CAX 软件的跨学科培养体系也没有建立起来。

从职业教育看，我国 CAX 软件类职业教育“基本空白”。

从社会储备看，纯软件开发人员有一定的社会储备量，但工程开发复合型人才储备少。

人才成长缺乏系统培训体系。我国工业软件企业大部分仍采用“师徒制”等内部培养方式，缺乏系统培训体系，过度依赖人才的个人提升，人才成长动力不足，使得工业软件企业面临较大的人才流失风险。

产业化难题

目前 CAX 工业软件厂商竞争力不足，国外占主导。

我国工业软件在关键技术、工业需求结合方面与国外产品存在较大差距。

我国工业软件产业价值链仍不完善，新兴产业环节主体缺失。

4.3 政策建议

4.3.1 基金政策扶持

计算几何学科是 CAX 工业软件的核心基础，包括 CAD、CAM、CNC、网格处理、等几何分析等软件的关键技术源于计算几何学科。然而，在目前国家自然科学基金委的学科分类下，计算几何隶属于计算数学学科下的一个分支方向，同偏微方程数值解等其它支相比，获得的基金支持很少，比如受资助数量少（每年 2 项左右），难以取得人才称号（迄今无人获得人才称号）等，这大大限制了计算几何这类弱势但非常重要的学科的发展。建议基金委对计算几何方向予以适当政策倾斜，比如设立专项或定向人才/基金项目，在一段时间内给与计算几何稳定的支持。

4.3.2 政府层面统筹决策

目前，国家针对 CAD 等重点领域工业软件已经从多方面多渠道做出部署与扶持，然而，来自不同部委的项目经常出现重复规划、子任务重叠的现象，增加了不必要的人力成本与学科投入。建议在更高层面(如中央科技委下)成立跨部委的联席会议，统筹决策与规划项目，并在联席会议下进行定期的技术交流。

4.3.3 学科层面的组织联结

CAD/CAE/CAM 一体化是未来设计研发类工业软件发展的国际前沿趋势。过去我国的学科分类或基金分组中，这几个领域往往各自分离、独立发展，而在数字化设计与制造流程中，三个领域承前启后、互相影响、缺一不可。建议基金委/科技部在学科组织层面将三个学科统筹规划，加强组织联结。

4.3.4 人才培养与产学研

目前从事 CAX 研究与开发的人才十分稀缺。为加大 CAX 研发人才的培养，急需面向研究生开设计算几何相关的基础课程设置以及面向研发人员的系列培训课程。

第五章 符号计算软件

5.1 符号计算及软件概述

符号计算（Symbolic Computation）通过使用符号来表示与操作数学对象，以进行精确的数学计算。

符号计算最初是人工智能的一个分支。第一代人工智能是逻辑或符号人工智能，即以逻辑推理为核心的自动推理、专家系统、知识工程等。而在计算机上实现逻辑推理需要符号计算软件的支撑。符号计算软件的发展标志是美国 J. Slagle 在 1961 年用表处理语言 Lisp 所写的第一个自动符号积分程序 SAINT。而第一个通用符号计算软件 Macsyma 是由人工智能创始人之一 Minsky 的学生 Martin 与 Moses 等人在 Darpa 的支持下于 MIT 开发。早期的符号计算系统主要是在美国的麻省理工学院、贝尔实验室和 IBM 公司研制开发的。

符号计算与我国数学家吴文俊院士倡导的数学机械化研究密切相关。在逻辑推理方面有两个里程碑式的工作：Goedel 证明，任意包含 Peano 算术的相容公理体系是不可判定的；Cook 证明，命题逻辑的自动定理证明是 NP 完全的。

5.2 通用符号计算系统

目前最为流行的商业通用符号计算软件是 Maple 和 Mathematica。他们的共同特点是以符号计算为核心，同时又包含了数值计算、数据分析、系统仿真等应用模块。以 Maple 为例，Maple 最初是一个纯粹的符号计算软件，主要用于各种数学问题的符号求解，服务于科学研究与教学。在其符号计算的基础上，Maple 又逐渐发展了数值计算、数据分析、图形绘制等功能。近期推出的 MapleSim 则可以用于复杂系统的建模与仿真。

5.3 符号计算专用系统

除了通用的符号计算软件系统外，还有多个专用符号计算系统。如计算群论系统 GAP、计算交换代数系统 CoCoA、计算数论系统 PARI 以及算法库 NTL 等。发展专用符号计算软件主要有三个目的。首先，与通用软件相比，专用软件可以在自己的领域内实现更加复杂与先进的算法，提供更强大的计算能力。

国际上的知名通用符号计算软件有 GAP、CoCoA、Singular。

20 世纪 80 年代初期，吴文俊编写的“China-Prover”首次实现了几何定理的高

效机器证明。此后 20 余年，我们在数学机械化的主要方面包括方程求解、机器证明、几何作图、Ore 多项式、混合计算等形成了多个成功的软件。但是其中大部分都是在其他软件，如 Maple 的基础上开发的，还没有一个基于我们自己理论的，真正独立的通用软件平台。数学机械化平台 MMP 就是在这样的背景下，在国家“973”项目《数学机械化与自动推理平台》支持下开发的。

MMP 是一个基于 C++ 语言在微软 Windows 界面下开发的数学软件。其核心功能围绕吴文俊发展的数学机械化基本理论，包括多项式方程系统、代数常微分方程系统、代数偏微分系统方程的特征列方法与投影定理、几何定理的机器证明等。为了实现这些功能，MMP 还包含一个符号计算基本运算系统作为支撑部分。此外，作为数学机械化方法的应用，MMP 开发团队还实现了方程求解、机器证明的各种方法。MMP 由支撑系统、符号计算系统、核心模块与应用模块四个部分组成。

5.4 自动推理软件系统

自动推理与形式化方法是计算机科学领域中基于严格数学理论的一种技术。定理形式证明技术是利用形式化方法，通过把系统和系统属性表示成数学定理的形式来完成验证，这一验证过程主要通过公理和推理规则实现。定理证明按照自动化程度分类，又包括自动定理证明与交互式定理证明。

历史上，最早开发的定理证明系统都是自动定理证明。如，Newell 和 Simon 的“逻辑理论家”程序，可以证明怀特海和罗素《数学原理》中命题逻辑部分的一个很大子集。功能完整的自动定理证明系统包括：McCune 的一阶逻辑定理证明器 Otter、Boyer-Moore 定理证明器(NQTHM)、Prolog 等等。目前使用最为广泛的自动定理证明器是各类 SAT 求解器，如 MiniSat。虽然 SAT 求解是 NP 难的，但是由于几乎所有自动推理最后都可以归结为 SAT 求解，因此人们发展了大量 NP 求解的有效算法与软件。

由于自动定理证明是 NP 难，目前使用最为广泛的自动定理证明系统是交互式定理证明系统。交互式定理证明使用一些高效但不完全的自动推理工具进行自动推理。在自动推理不能进行下去的时候，允许用户通过增加引理等手段提供证明思路。如此多次反复，最后由计算机自动生成证明。由此生成的证明，虽然不是完全自动的，却是严格验证的。交互式定理证明系统已经被用于若干数学难题的解决与

关键软件与芯片准确性的计算机验证。

5.5 面临的问题及对策

目前的主流通用的符号计算软件系统均由西方国家开发和掌握。某些领域有些替代产品，但是技术成熟度和功能均与国外产品存在巨大差距，我国在这方面存在明显的短板，补齐这个系统短板是重中之重。

符号计算软件开发既依赖符号计算领域的基础研究方面的突破，也依赖计算机科学，特别是软件工程，对软件本身开发效率、管理、开发工具等的支持。符号计算软件，特别是与应用相关的软件模块是一个交叉问题，必须发挥学科交叉特点。

近期一个新的趋势是将深度学习，特别是大语言模型的强大计算能力用于符号计算与数学定理的自动证明，并已经取得若干进展。由于大语言模型的开发需要一定的算力门槛，这一方面的研究更需要多学科交叉与经费的支持。

符号计算软件系统，特别是通用系统，需要开发团队“十年磨一剑”长周期的人员投入，并且需要构建应用生态及其稳定更新与维护，这意味着需要长期稳定的经费投入来支持前期的开发。从实验室走向市场实现商业化也是一条好的路径，这个产业化之路也是需要很多政策的扶持。

第六章 统计计算软件

6.1 统计软件现状和未来

统计计算软件在数据分析和统计建模领域中发挥着重要作用，为研究人员、统计学家和数据科学家提供了强大的工具，用于处理、分析和解释数据。

近年来，受到对数据分析和机器学习的不断增长的需求的推动，统计计算软件的发展有了重大的进展。一些显著的发展包括：

1.集成开发环境（IDE）：RStudio、Jupyter Notebook 和 Spyder 等 IDE 提供全面的统计计算环境，提供代码编辑、交互式执行和数据可视化等功能。

2.开源软件：R、Python 和 Julia 等开源统计计算软件由于其灵活性、社区支持和丰富的库而获得广泛采用。它们通过使先进的技术对更广泛的用户群体可用，实现了统计分析的民主化。R 的丰富包生态系统和 Python 的灵活性以及与 TensorFlow 和 PyTorch 等机器学习框架的集成，使它们成为数据科学家的热门选择。

3.基于云的解决方案：云计算使开发基于云的统计计算平台成为可能。Google Colaboratory、Microsoft Azure Notebooks 和 Amazon SageMaker 等服务允许用户在云中进行数据分析和建模，利用可扩展的计算资源。

统计计算软件的未来具有许多令人兴奋的前景：

1.与大数据和人工智能的整合：统计软件将继续发展，以处理大规模数据，并与人工智能和机器学习技术无缝整合。将开发高效的算法和分布式计算框架，以处理和分析海量数据集。

2.交互式和可视化数据分析：重点将放在增强交互式 and 可视化数据分析能力上。将开发能够进行探索性数据分析、实时可视化和交互式仪表板的工具，使用户能够快速获取洞察。

3.自动化和自动机器学习：统计计算软件将越来越多地自动化复杂任务，如特征工程、模型选择和超参数优化。将自动机器学习技术集成到统计软件中，使用户能够专注于更高级别的分析。

4.可重现性和协作：统计计算中将更加强调可重现性和协作。将开发促进可重复研究、版本控制和协作工作流程的工具，促进数据分析的透明度和可重复性。

5.隐私和伦理：随着数据隐私和伦理考虑的重要性日益凸显，统计计算软件将

发展以纳入保护隐私的技术和伦理准则。将开发提供注重隐私的分析和解决数据分析中的偏见的工具。

6.2 我国的研究基础、特色和优势

目前我国有许多互联网企业具有很好的数据分析能力，有许多公司提供了数据管理和数据分析的解决方案，主要用于大型企业的数据管理、数据分析、商业智能，但所用的基础软件不一定是自研的，当使用国外软件受到限制时这些公司的产品也可能会受到限制。例如，星环科技是上市公司，提供大数据解决方案和软件产品，统计分析方面主要是机器学习建模。又如，帆软软件，其产品 FineReport（报表软件）和数据分析系统 FineBI（商业智能软件）都很出色。

近年来，通过积极开发和推广各种统计计算工具和平台，以支持数据分析、建模和决策过程，我国在统计计算软件领域已经取得了显著进展，具有一定的研究基础。也有一些国产的小型统计分析软件，但在学术界的影响力不够广泛。例如，马克威分析系统是上海天律信息技术有限公司独立研制的商业软件，有单机版本，具有比较齐全的数据管理和统计建模、机器学习功能。以下是我国在统计计算软件方面的当前状况的一些显著特点：

1. 开源工具：我国积极参与开源统计计算工具的开发和采用。R、Python 及其相关库和框架在学术界和工业界广泛应用于统计分析、数据可视化和机器学习。

2. 数据科学和人工智能的快速发展：随着我国数据科学和人工智能的快速发展，对统计计算软件的需求不断增加。许多组织和研究机构积极开发统计计算工具，专门满足我国市场和研究需求。

3. 与大数据分析的整合：我国在大数据分析方面取得的进展使统计计算软件与大数据平台进行了整合。Apache Hadoop、Spark 和 TensorFlow 等工具被广泛用于大规模数据处理、分布式计算和机器学习任务。

4. 领域特定软件：我国还开发了针对特定行业需求的领域特定统计计算软件。例如，在金融、医疗保健和电子商务领域，存在专门针对这些领域独特需求的统计计算工具。

5. 政府倡议和支持：政府认识到统计计算软件在推动技术创新方面的重要性，并推出了支持其发展的倡议。这包括资助研究项目、促进学术界和工业界的合作，

并在各个领域推广统计计算的使用。

6.教育和培训：大学和研究机构提供全面的统计计算和数据分析课程和培训。这些举措旨在培养能够有效利用统计计算软件的熟练人才。

同时，作为人口基数庞大的发展中大国，可以看到我国在统计计算软件领域具有以下优势：1.庞大的人才储备：我国在数学、统计学和计算机科学领域拥有庞大的人才储备。我国培养出大量熟练掌握统计计算和数据分析的专业人才。这个人才储备为统计计算软件的发展和进步做出了贡献。

2.市场潜力：我国拥有 14 亿人口，是统计计算软件的巨大市场。金融、医疗保健、电子商务和制造业等各个行业对数据分析工具和平台的需求不断增长。这个市场潜力吸引了投资，并推动创新统计计算解决方案的开发。

3.政府支持：我国政府认识到统计计算软件在推动技术创新和经济增长方面的重要性。政府实施了支持该领域研发的倡议，包括资金项目、研究拨款和政策激励措施。政府的支持加快了我国统计计算软件的发展。

4.与大数据的整合：我国的大数据分析得到了显著发展，受益于各种来源的海量数据的可用性。我国的统计计算软件在与大数据平台的整合方面具备良好的位置，能够高效处理和分析大规模数据集。这种整合增强了统计计算软件在处理复杂数据分析任务方面的能力。

5.产业合作：我国拥有活跃的科技产业和学术界与工业界合作的文化。这种合作促进了知识、思想和资源的交流，推动了实际和针对行业的统计计算软件解决方案的开发。研究人员、软件开发人员和行业专业人士之间的紧密合作增强了该领域的竞争力和创新力。

6.适应能力和创新性：我国的软件开发人员和研究人员在统计计算领域展现出很高的适应能力和创新性。他们积极参与开源项目，开发新的算法和方法，并根据我国市场的特定需求调整现有的统计计算工具。这种适应能力和创新性推动了我国统计计算软件的发展。

6.3 新的学科生长点

统计计算与大数据分析与机器学习的紧密结合是统计计算软件领域不可多得的发展机会。其中，概率编程语言有潜力塑造统计计算软件的未来，是极具希望的

学科生长点。概率编程的下列几个优势，与数据分析和建模不断发展的需求相吻合，使其在未来统计计算软件领域发挥重要作用。

1.模型灵活性：概率编程使用户能够以更自然和的方式表达复杂的统计模型。它允许在模型中引入不确定性、依赖性和层次结构。随着数据变得越来越多样化和复杂化，这种灵活性尤为重要，需要使用复杂的建模技术。

2.推断和不确定性量化：概率编程框架提供了贝叶斯推断和不确定性量化的内置算法。这些框架自动化了估计模型参数、执行后验推断以及在整个分析过程中传播不确定性的过程。这简化了建模过程，并提供了关于结果的更丰富的不确定性洞察。

3.机器学习的整合：概率编程通过允许结合概率模型和机器学习技术，弥合了统计建模和机器学习之间的差距。它实现了结构化统计建模与强大的深度学习和神经网络架构的组合。这种整合在解决需要既进行概率推理又能从数据中学习模式的复杂实际问题时至关重要。

4.可重复性和透明性：概率编程促进了统计分析的可重复性和透明性。通过将模型和推断过程明确表示为代码，分享、复现和验证结果变得更加容易。这增强了协作，促进了知识共享，并支持了严格的科学研究。

5.自动微分：许多概率编程框架利用自动微分技术，实现了高效的基于梯度的优化。这使得可以使用强大的优化算法进行模型校准和参数估计，从而实现更快速、更准确的分析。

6.领域专用库：概率编程框架通常附带领域专用库，提供预定义的模型、分布和推断算法。这些库帮助用户快速入门，并更容易构建针对特定领域（如金融、医疗保健或社会科学）的复杂模型

7.与现代人工智能技术的结合。许多人工智能技术，如深度生成模型等，本质上也是概率模型，可基于概率编程框架来实现。

6.4 发展国产统计计算软件的思考

目前虽然有一些国产的统计计算软件，但在各个科研和企事业单位应用较少。究其原因，一方面是国外的知名软件已经被使用很多，所以科研人员一开始学习的就是这些软件，学习使用新的国产软件有一定入门门槛。另外，在科研单位，科研

人员有发表 SCI 论文的压力，计算结果一般需要使用知名的软件。在企业中，一般也愿意使用著名的自由软件和更可靠的商业软件。国产的软件用户量少，就不能得到充足的开发资金，也不能获得及时的用户反馈，不利于软件质量的提高，这与国产操作系统的问题类似。

随着国际竞争的激烈化，以美国为首的西方阵营可能会用各种方法限制我国的软件使用。所以，一些关键性的统计计算软件功能，应该预先进行框架设计，算法储备，在必要时迅速上马完成开发。最优先考虑的是统计计算所需要的基层计算功能，如数学软件编程语言、矩阵计算、数值积分、最优化、随机模拟等。这些基层功能需要高水平的算法专家和编程人员完成，需要软件功能可靠、结果准确、运行高效、使用比较方便。有了这些基层功能后，其它功能可以由各统计方向组织人力完成。