



# 解法器快速算法及应用研讨会

## (Solver2018)



时 间： 2018年6月22-25日

地 点： 湖南·湘潭·韶山

主办单位： 北京应用物理与计算数学研究所  
湘潭大学

承办单位： 湘潭大学数学与计算科学学院  
科学与工程计算与数值仿真湖南省重点实验室

# 2018 年解法器快速算法及应用研讨会 (Solver2018) 通知

6 月 22 日—6 月 25 日 湖南·湘潭·韶山

**会议主题：**面向大规模科学与工程计算的解法器算法设计、理论分析、性能优化、软件及应用，包括但不限于

- 线性代数方程组并行算法；
- 非线性代数方程组求解算法；
- 特征值问题并行算法；
- 应用驱动快速算法；
- 稀疏矩阵与图计算相关的算法与性能优化；
- 解法器软件与性能调优工具；
- 解法器在实际数值模拟中的应用。

**会议形式：**该研讨会是一个系列会议，每年举行一次。会议公开征集报告、组织面向特定问题的专题研讨。被接受的报告均安排 20 分钟演讲（含提问）。欢迎解法器领域的同行及研究生投稿、参会。

**组织者 (按姓名拼音顺序)：**

舒 适(湘潭大学)  
谢和虎(中科院计算数学研究所)  
徐小文(北京应用物理与计算数学研究所、中物院高性能数值模拟软件中心)  
杨 超(北京大学)  
杨 银(湘潭大学)  
张晨松(中科院计算数学研究所)

**程序委员会 (按姓名拼音顺序)：**

安恒斌(北京应用物理与计算数学研究所、中物院高性能数值模拟软件中心)  
陈荣亮(中科院深圳先进技术研究院)  
崔 涛(中科院计算数学所)  
冯春生(湘潭大学)  
高兴誉(北京应用物理与计算数学研究所、中物院高性能数值模拟软件中心)  
谷同祥(北京应用物理与计算数学研究所)  
李胜国(国防科技大学)  
舒 适(湘潭大学)  
谭光明(中科院计算技术研究所)  
肖映雄(湘潭大学)  
谢和虎(中科院计算数学所)

徐 然(中物院高性能数值模拟软件中心)  
徐小文(北京应用物理与计算数学研究所、中物院高性能数值模拟软件中心)  
薛 巍(清华大学)  
杨 超(北京大学)  
岳孝强(湘潭大学)  
赵勋旺(西安电子科技大学)  
张晨松(中科院计算数学研究所)  
钟柳强(华南师范大学)

**主办单位：** 北京应用物理与计算数学研究所  
湘潭大学

**承办单位：** 湘潭大学数学与计算科学学院  
科学与工程计算与数值仿真湖南省重点实验室

**报到与会务事宜：**

- 1、报到时间：2018年6月22日下午14点开始；报到地点：韶山宾馆三号楼酒店大堂。
- 2、会务费用：会议注册费1000元(由酒店代开发票)；整个会议期间(6.22-6.25)食宿自理。
- 3、住宿标准：韶山宾馆三号楼、双人标准间328元(含早)；佳美酒店、双人标准间138元/间(不含早)。由于韶山宾馆预定房间数量有限，所有学生入住佳美酒店。
- 4、会议联系人：冯春生 186-7326-5192, [spring@xtu.edu.cn](mailto:spring@xtu.edu.cn)。  
会议网址：<http://math.xtu.edu.cn/solver/>。
- 5、会议微信群，请扫描加入



## 6月23日上午详细日程

地点：韶山宾馆三号楼三楼大会议室

时间	内容
8:30-9:30 主持人 舒适	湘大数学院领导致辞 会议与参会者介绍 合影
9:30-10:30 主持人 钟柳强	安恒斌(北京应用物理与计算数学研究所) 9:30-9:50 热-力-接触耦合应用的一类预处理方法
	张晨松(中国科学院计算数学研究所) 9:50-10:10 Preconditioning and Decoupling Methods for Multicomponent Flows in Porous Media
	舒适(湘潭大学) 10:10-10:30 Adaptive BDDC algorithms for the system arising from plane wave discretization of Helmholtz equation
10:30-10:45	茶歇
10:45-12:05 主持人 张晨松	Mingchao Cai (Morgan State University, USA) 10:45-11:05 Fast solvers for models of fluid flow, linear elasticity and poroelasticity
	冯春生(湘潭大学) 11:05-11:25 一种非定常线弹性问题的自适应并行算法
	黄学海(温州大学) 11:25-11:45 Fast Auxiliary Space Preconditioners for Linear Elasticity in Mixed Form
	谌稳固(北京应用物理与计算数学研究所) 11:45-12:5 Sparse solutions of under determined linear equations
12:05-14:00	午餐

## 6月23日下午详细日程

地点：韶山宾馆三号楼三楼大会议室

时间	内容
14:00-15:40 主持人 谢和虎 张 硕	张 硕（中国科学院计算数学研究所） 14:00-14:20 On the high-efficiency algorithm for fourth-order eigenvalue problems
	徐 飞（北京工业大学） 14:20-14:40 Parallel multilevel correction method for eigenvalue problems
	游春光（中物院高性能数值模拟软件中心） 14:40-15:00 求解特征值问题的一种并行辅助子空间方法
	高兴誉（北京应用物理与计算数学研究所） 15:00-15:20 The preconditioning methods for self-consistent iteration of Kohn-Sham density functional theory
	谢和虎（中国科学院计算数学研究所） 15:20-15:40 一种求解特征值问题的广义共轭梯度方法
	15:40-15:55
15:55-17:15 主持人 谭光明	黎雷生（中国科学院软件研究所） 15:55-16:15 神威太湖之光 SW26010 处理器 Kohn-Sham 方程特征值求解器移植和优化
	王银山（中国科学院计算技术研究所） 16:15-16:35 可自动调优的高性能稀疏矩阵算法库
	刘伟峰（挪威科技大学） 16:35-16:55 稀疏三角方程的可扩展性分析
	徐 然（中物院高性能数值模拟软件中心） 16:55-17:15 数值代数解法器 JPSOL 及其应用介绍
17:15-17:55 主持人 徐小文	主题讨论
17:55-19:45	晚餐
20:00-21:30	红色文化学习 《中国出了个毛泽东》

## 6月24日详细日程

地点：韶山宾馆三号楼三楼大会议室

时 间	内 容
8:30-10:10 主持人 安恒斌	谷同祥（北京应用物理与计算数学研究所） 8:30-8:50 具有周期结构的大型稀疏线性方程组高效求解
	闫争争（中国科学院深圳先进技术研究院） 8:50-9:10 全隐 Newton-Krylov-Schwarz 求解器在高速列车外流场模拟中的应用
	蒋毅（中科院深圳先进技术研究院） 9:10-9:30 求解非局部电介质模型的一类 Newton-Krylov-Schwarz 算法
	徐雪枫（中国科学院计算数学研究所） 9:30-9:50 On Designing the Interpolation Operator in Algebraic Multigrid Methods
	徐小文（北京应用物理与计算数学研究所） 9:50-10:10 解法器：实际应用离 Poisson 方程有多远？
10:10-10:25	茶歇
10:25-11:45 主持人 薛巍	岳孝强（湘潭大学） 10:25-10:45 Parallel-in-Time with SFVE Multigrid for Radiation Diffusion Equations
	顾先明（西南财经大学经济数学学院） 10:45-11:05 Fast and parallel numerical schemes based on preconditioned iterative solvers for time-space fractional differential equations
	井浩（清华大学） 11:05-11:25 Wavenumber domain optimization method beyond Nyquist frequency for wave equations
	胡洋（清华大学） 11:25-11:45 不可压两相流动的保物理特性相场模拟方法
11:45-12:15 主持人 舒适	Solver2019 讨论
12:15-14:00	午餐
14:00-18:00	自由讨论
18:00-19:00	晚餐

## 报告摘要

### 热-力-接触耦合应用的一类预处理方法

安恒斌

北京应用物理与计算数学研究所

在热-力-接触耦合的结构力学数值模拟应用中, 由于离散线性系统规模大, 系数矩阵非对称并非常 M 矩阵, 使得线性系统的求解具有很大难度。如果直接采用代数多重网格 (AMG) 预处理的 Krylov 子空间方法, 例如 GMRES 方法或 BiCGStab 方法进行求解, 则迭代收敛非常困难。通过对于问题进行分析, 首先针对力学模型, 构造了一类基于算子层面的预处理。该预处理将原始的关于位移的耦合方程近似为三个独立的关于各个方向位移的扩散方程, 这对于 AMG 方法非常友好。进一步, 针对热-力耦合模型问题, 通过将热-力耦合模型近似为四个独立的扩散型方程, 构造了相应的预处理。最后, 针对接触计算, 通过结合接触计算的变换矩阵以及热-力耦合的预处理, 获得了热-力-接触耦合计算情形下预处理。通过我们构造的预处理, 有效支持天生桥模型 11 亿自由度的大规模数值模拟计算。

.....

### Preconditioning and Decoupling Methods for Multicomponent Flows in Porous Media

张晨松

中国科学院计算数学研究所

We examine linear algebraic solvers for a general purpose compositional simulator. In particular, the decoupling stage of the constraint pressure residual preconditioner for linear systems arising from the fully implicit scheme is evaluated. An asymptotic analysis of the convergence behavior is given when time stepsize approaches zero. Based on this analysis, we propose an analytical decoupling technique, from which the pressure equation is directly related to an elliptic equation and can be solved efficiently. We show that this method ensures good convergence behavior of the algebraic solvers in a two-stage preconditioner. We also propose a semi-analytical decoupling strategy that combines the analytical method and alternate block factorization method. Numerical experiments demonstrate the superior performance of the analytical and semi-analytical decoupling methods compared to existing methods.

# Adaptive BDDC algorithms for the system arising from plane wave discretization of Helmholtz equation

舒适

湘潭大学

Balancing domain decomposition by constraints (BDDC) algorithms with adaptive primal constraints are developed in a concise variational framework for the weighted plane wave least-squares (PWLS) discretization of Helmholtz equations with high and various wave numbers. The unknowns to be solved in this preconditioned system are defined on elements rather than vertices or edges, which are different from the well-known discretizations such as the classical finite element method. Through choosing suitable “interface” and appropriate primal constraints with complex coefficients and introducing some local techniques, we developed a two-level adaptive BDDC algorithm for the PWLS discretization, and the condition number of the preconditioned system is proved to be bounded above by a user-defined tolerance and a constant which is only dependent on the maximum number of interfaces per subdomain. A multilevel algorithm is also attempted to resolve the bottleneck in large scale coarse problem. Numerical results are carried out to confirm the theoretical results and illustrate the efficiency of the proposed algorithms.

.....

# Fast solvers for models of fluid flow, linear elasticity and poroelasticity

Mingchao Cai

Morgan State University

Fluid flow model, linear elasticity model, and poroelasticity model have wide applications in geosciences and biomechanics. For example, blood-vessel wall interactions are modeled by using both fluid flow model and elasticity model; brain edema and cancellous bones are usually modeled by using poroelastic models. In this presentation, I will discuss the Cahouet-Chabard preconditioner using exact and inexact Multigrid solvers for incompressible fluid flow model under the MAC finite difference discretization, the two-level overlapping Schwarz methods for linear elasticity model under a stable Finite Element discretization, and some solvers for poroelasticity model under the MAC discretization and a stabilized Finite Element discretization.



# 一种非定常线弹性问题的自适应并行算法

冯春生

湘潭大学

针对一种非定常线弹性模型, 建立了时空方向分别采用有限差分 and 线性有限元离散的全离散隐格式, 数值实验表明了格式在离散  $L^2$  范数下具有  $O(\tau + h^2)$  误差阶. 接着, 证明了系数矩阵的条件数估计式, 并设计了相应的求解 L-氏网格下的全离散格式的自适应快速算法; 考察了网格质量对 AMG-CG 法效率的影响, 设计了一种基于自适应网格优化的高效 AMG-CG 法, 数值实验表明所设计的这两种自适应算法是快速、健壮的. 最后, 为上述自适应算法设计了并行求解算法, 并基于 MPI 并行编程环境设计相应的求解器模块, 数值实验考察了该并行算法的正确性和扩展性.

.....

## Fast Auxiliary Space Preconditioners for Linear Elasticity in Mixed Form

黄学海

温州大学

A block diagonal preconditioner with the minimal residual method and an approximate block factorization preconditioner with the generalized minimal residual method are developed for Hu-Zhang mixed finite element methods for linear elasticity. They are based on a new stability result for the saddle point system in mesh-dependent norms. The mesh-dependent norm for the stress corresponds to the mass matrix which is easy to invert while for the displacement it is spectral equivalent to the Schur complement. A fast auxiliary space preconditioner based on the  $H^1$  conforming linear element of the linear elasticity problem is then designed for solving the Schur complement. For both diagonal and triangular preconditioners, it is proved that the conditioning numbers of the preconditioned systems are bounded above by a constant independent of both the crucial  $\lambda^*$  constant and the mesh-size. Numerical examples are presented to support theoretical results. As by products, a new stabilized low order mixed finite element method is proposed and analyzed and superconvergence results for the Hu-Zhang element are obtained.

## Sparse solutions of underdetermined linear equations

谌稳固

北京应用物理与计算数学研究所

In this talk, we consider sparse solutions of underdetermined linear equations with structures. The structure includes sparsity, block structure or the context when some prior information on the support of the signals is available. Moreover, we consider the optimality or sharpness of these sufficient conditions.

.....

## On the high-efficiency algorithm for fourth-order eigenvalue problems

张硕

中国科学院计算数学研究所

On the high-efficiency algorithm for fourth-order eigenvalue problems, the talk is two-folded, which includes an optimal multilevel algorithm for the biharmonic eigenvalue problem and an adaptive algorithm associatedly. The main ingredient of the method is an order-reduced formulation of the eigenvalue problem, which admits flexible discretizations. Theoretical analysis and numerical experiments will be presented.

.....

## Parallel multilevel correction method for eigenvalue problems

徐飞

北京工业大学

A parallel multilevel correction method is proposed for eigenvalue problems. The main idea is to transform the solution of the eigenvalue problem into a series of solutions of the corresponding linear boundary value problems on the sequence of finite element spaces and eigenvalue problems on a very low dimensional space. The computational efficiency can be improved since we do not need to solve the eigenvalue problems in the fine space directly. Besides, for different eigenvalues, the corresponding boundary value problem and low dimensional eigenvalue problem can be solved in the parallel way since they are independent for each other and no data exchanging. This property means that we do not need to do the orthogonalization in the high dimensional spaces.

# 求解特征值问题的一种并行辅助子空间方法

游春光

中物院高性能数值模拟软件中心

类似于求解线性方程组的多重网格算法,本报告介绍求解特征值问题的一种并行多重网格算法框架 (Parallel Auxiliary Subspace Eigensolver), 包含前光滑, 粗网格校正, 后光滑等标准流程。通过代数多重网格构造子空间, 该框架将多重校正思想与经典的迭代方法 (如反幂法, LOBPCG 方法等) 结合, 以期达到快速求解的目的。理论分析和数值实验表明, 该方法具有几乎最优的计算量和存储量, 并在多个特征值的并行求解方面具有巨大潜力。

.....

# The preconditioning methods for self-consistent iteration of Kohn-Sham density functional theory

高兴誉

北京应用物理与计算数学研究所

Kohn-Sham density functional theory has been widely used in the first-principles calculations of materials. It is a usual practice to calculate the occupied orbitals for semiconducting, insulating or isolated systems. It differs significantly in metallic systems and partial occupancies have to be included at the same time. In the language of optimization, this is an ill-conditioning problem with partial occupancies treated as additional variational degrees of freedom. We will find the origin of the conditioning problem related to metallic systems and discuss specific strategies for it.

An alternative approach is to solve the fixed-point problem generalized from the Kohn-Sham equation by the self-consistent field (SCF) iteration. We develop a modified Kerker preconditioning scheme that captures the long-range screening behavior of inhomogeneous systems and thus improves the SCF convergence. For situations without a priori knowledge of the system, we design the a posteriori indicator to monitor if the preconditioner has suppressed charge sloshing during the iterations. Based on the a posteriori indicator, we demonstrate two schemes of the self-adaptive configuration for the SCF iteration. This is a joint work with Yuzhi Zhou, Han Wang, Yu Liu and Haifeng Song.

# 一种求解特征值问题的广义共轭梯度方法

谢和虎

中国科学院数学与系统科学研究院

摘要：在求解大型稀疏特征值的时候，通常的 Arnoldi 方法或者 Lanczos 方法都需要对包含的线性方程组进行精确的求解，否则就会导致数值的不稳定性。但是对于大型稀疏矩阵的特征值求解来说，精确求解线性方程组不是一种有效的方式，同时不适合进行大规模的并行计算，所以需要去设计对线性方程求解精度依赖性弱的稳定的特征值求解算法。本报告将介绍一下最近设计的一种简单的求解特征值问题稳定的共轭梯度方法，并介绍其在一些力学结构模态分析中的应用。

.....

# 神威太湖之光 SW26010 处理器 Kohn-Sham 方程特征值求解器移植和优化

黎雷生

中国科学院软件研究所

摘要：第一原理计算量子力学软件是重要的科学计算软件，Kohn-Sham 方程特征值求解器是其中主要的模块。面向神威太湖之光 SW26010 众核处理器，结合常用的第一原理软件 VASP，对其中的 DAV 和 RMM 两种特征值求解器进行移植和优化。首先针对主核进行移植，评测其性能，找出计算热点。然后分别对矩阵运算、FFT 和热点函数等三类计算密集的函数进行从核并行和优化。最后使用典型算例验证优化的效果。

.....

# 可自动调优的高性能稀疏矩阵算法库

王银山

中国科学院计算技术研究所

摘要：稀疏矩阵相关算法是数值领域中典型的非规则算法，被广泛应用于各个领域数值计算中。随着现代计算机体系结构的不断发展，异构加速逐渐成为高性能计算新的发展方向，这给已有的稀疏矩阵算法库在性能优化和移植性上带来了严峻的挑战。本文尝试构建一个可自动调优的高性能稀疏矩阵算法库以应对该挑战，该算法库主要包括以下几个特点：

一、在数据管理方面，算法库支持多种矩阵存储格式，以确保不同特征的矩阵能够采用最佳存储格式；支持三种数据划分方式：行划分、非零元个数划分和权重划分，以达到负载均衡要求。

二、在并行化方面，算法库实现了“MPI+X”的编程范式“X”包括了 OpenMP, GPU, MIC，满足不同的用户需求并适应不同的计算平台，同时算法库在 CPU 上支持 SSE 指令集和 AVX 指令集的 SIMD 优化，并对现代 ccNUMA 存储架构做了适应性优化。

三、在易用性方面，算法库实现了存储细节和通信细节的隐藏。用户只需要使用与稀疏矩阵相关的创建、初始化和计算接口即可，不需要关心具体的存储细节；此外算法库将相应

的矩阵通信句柄封装在矩阵数据结构中,并在底层支持多种通信策略以根据输入矩阵数据结构自动选择最优通信方案,为用户提供了屏蔽底层硬件和通信细节的简单易用的函数接口。

四、性能优化方面,算法库针对 SPMV kernel 进行了特殊的优化,包括 SMAT 自动调优(该模块根据离线学习的模型,自动分析输入矩阵特征并选择性能最优所对应的储存格式进行计算)、稀疏矩阵切分和稀疏矩阵列压缩技术;统计结果显示,SMAT 的预测平均准确度 86% 以上,SMAT 版本的 SPMV kernel 性能可以达到最优性能的 97%,因此在多次调用 SPMV 的算法中调用 SMAT 将显著提升计算性能。此外算法库对瘦高型 ( $AM \times N, M \gg N$ ) 矩阵乘的情形进行了分块优化策略,与 MKL-GEMM 相比最高可获得 10 倍加速比。

该算法库目前仍在进一步优化更多的稀疏矩阵运算 kernel,并尝试支持更多的应用层解法器以提升重大应用中的解法器性能。可自动调优高性能稀疏矩阵算法库将进一步完善和提升性能以帮助更多的领域应用工作者更好地应对异构计算所带来的性能优化和移植性方面的严峻挑战!

.....

## 稀疏三角方程的可扩展性分析

刘伟峰

挪威科技大学

稀疏三角解 (sparse triangular solve) 在稀疏解法器中被经常调用。由于其内在的串行特性,稀疏三角解的并行化比很多稀疏算子都更为困难。近年来,广泛使用的众核处理器给稀疏三角解的并行优化提出了新的挑战。本报告将基于一系列测试数据,讨论已有并行稀疏三角解算法在众核处理器 (GPU 和 Xeon Phi) 上的可扩展性问题。

.....

## 数值代数解法器 JPSOL 及其应用介绍

徐然

中物院高性能数值模拟软件中心

本报告介绍中物院高性能数值模拟软件中心编程框架团队开发的数值代数库软件 (JPSol) 的架构和功能,重点报告线性解法器在能源、电磁环境、工程力学等重大工程和装备设计与分析中的应用情况。

# 具有周期结构的大型稀疏线性方程组高效求解

谷同祥

北京应用物理与计算数学研究所

考虑具有周期边界条件扩散方程离散后所得线性方程组的高效预处理技术。理论证明预处理技术的可行性。数值试验检验其高效性。

.....

# 全隐 Newton-Krylov-Schwarz 求解器在高速列车外流场模拟中的应用

闫争争

中国科学院深圳先进技术研究院

高速列车流场具有高雷诺数、时间相关、含相对运动以及计算区域几何复杂且呈多尺度等特征，带来网格处理耗时、离散后系统非线性强且计算量大等困难。本报告介绍一类基于非结构网格的全隐 Newton-Krylov-Schwarz 高可扩展快速求解器，并在神威太湖之光、天河二号平台上采用大涡模拟等高精度湍流模型求解高速列车的气动模拟问题，数值结果显示，该求解器可使用百万处理器核心数实现百亿规模非结构网格单元问题的计算，其中十万核与百万核的并行效率分别达到 69.5% 和 24.3%，显示该求解器具有良好的并行可扩展性能。

.....

# 求解非局部电介质模型的一类 Newton-Krylov-Schwarz 算法

蒋毅

中科院深圳先进技术研究院

非局部静电效应 (Nonlocal Electrostatic Effects) 是自然环境中离子溶液普遍具有的一种静电学特征。和经典模型相比，考虑了此效应的非局部电介质模型 (Nonlocal Dielectric Model) 准确地刻画了溶液中水分子因极化而产生的相互关联特性，对生物组织在分子尺度上的物理化学性质具有不可忽视的影响，并对研究和理解其在宏观尺度上的生化功能具有十分重要的意义。

非局部电介质模型在数学上通常被描述为一个具有积分-微分混合项的偏微分方程，对其进行直接数值十分困难，同时高精度求解往往还需要大规模的高精密网格，这些都对快速算法的设计提出了挑战。目前，针对这类模型的数值算法大多为传统的串行方法，其求解规模和效率严重受制于计算机的单机性能。为突破这一限制，我们将在本报告中介绍一类快速并行算法。首先，我们将基于 Newton-Krylov 方法构造整体迭代改进框架；在对模型方程进行有限元离散时，我们将引入辅助变量对其中的积分微分混合项作等价转化，从而避免产生具有稠密系数矩阵的离散线性系统；最后，我们将使用 Schwarz 区域分解方法构造高效预条件算子，以实现线性系统的大规模快速并行求解，并确保整体算法的良好可扩展性。

我们将在本报告中展示该并行算法的一些数值实验结果，并讨论其在生物分子相关工程中的一些应用前景。

# On Designing the Interpolation Operator in Algebraic Multigrid Methods

徐雪枫

中国科学院数学与系统科学研究院计算数学所

Various algebraic multigrid algorithms have been developed for solving problems in scientific and engineering computation over the past decades. They have been shown to be well-suited for solving discretized partial differential equations on unstructured grids in practice. One key ingredient of algebraic multigrid algorithms is a strategy for constructing an effective prolongation operator. Among many questions on constructing a prolongation, an important question is how to evaluate the quality of such an operator. In this talk, we introduce new characterizations (including sufficient condition, necessary condition, and equivalent condition) of the so-called ideal interpolation operator, which can provide new insights for designing practical algebraic multigrid algorithms. Moreover, we give a new expression for a class of ideal interpolation operators.

.....

## 解法器算法：实际应用离 Poisson 方程有多远？

徐小文

北京应用物理与计算数学研究所

随着超级计算能力的持续提升，实际应用数值模拟普遍呈现多物理耦合、多介质多时空尺度、强非线性强间断、大规模长时间积分等复杂特征，导致现有解法器算法保持最优或近似最优计算复杂度的难度越来越大，另一方面，算法还需具备良好的并行可扩展性。本报告以极小化求解时间为目标，讨论面向复杂应用特征和超大规模计算的解法器算法设计空间，给出了激光聚变、结构力学等应用的例子，并探讨若干值得关注的研究问题。

.....

## Parallel-in-Time with SFVE Multigrid for Radiation Diffusion Equations

岳孝强

湘潭大学

Future computing speed must rely on the increased concurrency provided by more, instead of faster, processors. An immediate consequence of this is that solution algorithms, limited to spatial parallelism, for problems with evolutionary behavior entail long overall computation time, often exceeding computing resources available

to resolve multidimensional PDEs. Thus, algorithms achieving parallelism in time are of especially high demand. Currently, parareal in time and multigrid-reduction-in-time (MGRIT) are two active choices. Observe that parareal can be interpreted as a two-level multigrid (reduction) method, its concurrency is still limited because of the sequential coarse-grid solve. MGRIT enables us to approximate simultaneously the evolution over all time points. It has been proven to be rather effective and analyzed sharply in the two-level setting for integer order parabolic and hyperbolic problems with the limitation that fine time-grid propagators are all the same. The main aim of the paper is to propose and analyze a non-intrusive optimal-scaling MGRIT solver for radiation diffusion equations in two and three spatial dimensions, where we shall extend the scope of the MGRIT algorithm to time-dependent fine time-grid propagators. Some numerical results are given to illustrate optimal convergence rates in both time and space.

.....

## Fast and parallel numerical schemes based on preconditioned iterative solvers for time-space fractional differential equations

顾先明

西南财经大学经济数学学院

In recent years, the time-space fractional differential equations (TSFDEs) play a vital role in many fields of engineering applications. Due to the nonlocal operators, the analytical solutions are only available for some special TSFDEs. Thus, extensive numerical approaches of TSFDEs become more and more popular in the recent studies. However, it is interesting to note that most numerical schemes still belong to the time-stepping methods built upon serial operations. The numerical parallel numerical schemes for TSFDEs should be more meaningful than the conventional time-stepping schemes in terms of computational effectiveness. In our talk, we will introduce two classes of “all-at-once” numerical schemes utilized parallel preconditioned iterative solvers for solving space fractional FDEs and TSFDEs. Our proposed methods employ the fast Toeplitz matrix-vector products via FFTs without requiring the storage of dense matrices, then both the computational complexity and the memory cost can be reduced. Theoretical analysis of the numerical scheme and parallel preconditioning techniques will be investigated. Finally, numerical experiments are reported to show the effectiveness of our proposed numerical schemes based on parallel preconditioned iterative solvers.



# Wavenumber domain optimization method beyond Nyquist frequency for wave equations

井浩

清华大学

According to the Nyquist–Shannon sampling theory, two sampling points per minimal wavelength are required to reconstruct the wave-field. However, high frequency components above the Nyquist frequency can be recovered theoretically by introducing spatial derivatives of the displacements. In this talk we propose a wavenumber domain optimization scheme for solving wave equations, which makes it practical for numerical simulation beyond the Nyquist frequency. The key idea is to approximate the spatial derivatives with wavenumber domain optimization in wave-fields represented by both the wave displacements and their gradients. By using extremely coarse grids, the new method achieves high computational efficiency to perform the same modeling accuracy. Theoretical analysis and numerical experiments for acoustic wave equation and shallow water wave equation will be presented.

.....

## 不可压两相流动的保物理特性相场模拟方法

胡洋

清华大学机械系

本文构造了一种保若干重要物理特性的相场模型。通过在相场界面追踪方程中引入合适的源项，我们提出的模型能够保证伽利略不变性、系统总质量守恒和相体积守恒得到满足。在算法的实现层面上，采用介观尺度的格子 Boltzmann 方法作为求解器，相场序参数的梯度项、动量方程的应力张量项等均可采用局部计算方法，提升了实现效率。

## 乘车路线介绍

### 韶山南站 — 韶山宾馆

韶山高铁南站出口即有：

大巴公交和的士搭乘至 — 韶山风景名胜区游客换乘中心 — 乘坐景区环保大巴至韶峰景区门楼下车 — 步行 5 分钟到韶山宾馆。

（大巴公交：高铁南站出口处的大巴公交上午 9:20-下午 5:00，费用 3 元；的士：打表计费；换乘景区环保大巴车辆费用：20 元/人，上午 8:00-下午 5:30）



韶山南站 — 换乘中心



换乘中心 — 韶山宾馆

**长沙黄花机场：**可以直接在机场乘坐磁悬浮列车到 — 长沙高铁南站 — 韶山高铁南站；  
（机场磁悬浮列车 — 长沙南，历时 20 分钟，快速平稳；长沙南 — 韶山南，一共 18 趟车次，上午 7:22-下午 6:20，票价 30.5，历时 23 分钟）

**长沙高铁南站：**可以转站到 — 韶山高铁南站；  
（长沙南 — 韶山南，一共 18 趟车次，上午 7:22-下午 6:20，票价 30.5，历时 23 分钟）

**湘潭北站：**可以转站到 — 韶山高铁南站；  
（湘潭北 — 韶山南，一共 3 趟车次，中午 12:47-下午 6:36，票价 18.5，历时 14 分钟）

## 湘潭大学数学与计算科学学院简介

数学与计算科学学院是湘潭大学成立最早的院系之一，其前身是成立于1974年的数理系，1981年获全国首批硕士点。目前拥有数学、统计学博士后科研流动站、一级学科博、硕士点，应用统计专业学位硕士点，数学与应用数学、信息与计算科学、统计学、数据科学与大数据技术四个本科专业和数学类（韶峰班）特色班，以及“科学工程计算与数值仿真”湖南省重点实验室、“智能计算与信息处理”教育部重点实验室、“计算科学”湖南科技创新国际合作基地、“国防科技数值算法与模拟”湖南省国防科技重点实验室、“工程结构动力学与可靠性分析”湖南省高校重点实验室等5个部省重点实验室。建有计算数学国家重点学科、1个国家国防特色学科、“应用数学”湖南省优秀重点学科、“数学”湖南省优势特色重点学科、“信息与计算科学”国家特色专业、“数学与应用数学”湖南省重点专业、“湖南省统计局”省研究生培养创新基地。数学学科在2012年全国第三轮学科评估中整体水平位居第16，在2017年全国第四轮学科评估中评估结果为B+。入选2017软科世界一流学科，于2017年5月进入ESI全球前1%。2014年数学与计算科学学院荣获“全国教育系统先进集体”称号。

数学与计算科学学院拥有一支结构合理、实力雄厚且充满活力的师资队伍，在岗教职工101人，专职教师89人，其中教授33人、博士生导师23人，副教授32人，70%以上教师具有博士学位者。多位教师入选了国家级和省部级人才工程：“万人计划”百千万工程领军人才1人、国家杰出青年科学基金获得者2人、“新世纪百千万人才工程”国家级人选1人、享受政府特殊津贴专家3人、全国优秀教师1人、“冯康科学计算奖”获得者2人、教育部“长江学者奖励计划”讲座教授1人、教育部“跨（或新）世纪优秀人才支持计划”入选者3人、湖南省科技领军人才1人、湖南省百人计划特聘教授2人、湖南省芙蓉学者计划特聘教授2人、湖南省杰出青年基金获得者1人、汤森路透高被引科学家1人，有20余人次任国内外专业期刊主编或编委。合作创办了SCI期刊Advances in Applied Mathematics and Mechanics，建有国家教学团队、教育部科技创新团队、湖南省自然科学基金创新群体、湖南省高校科技创新团队。

数学与计算科学学院已形成涵盖普通本科、硕士和博士（后）教育的多层次人才培养体系，曾获国家级教学成果二等奖、省级教学成果一等奖等多项，有国家精品（资源共享）课程、国家规划教材。毕业生中，涌现了一批在学术界和其

它领域出类拔萃的人才，其中袁亚湘、周向宇当选中国科学院院士，8人获国家杰出青年基金，7人次获国家级奖，7人次获冯康科学计算奖、陈省身数学奖、何梁何利科技进步奖、光华工程科技奖、陈嘉庚科学奖；6人次在国际数学家大会上作45分钟报告、国际工业与应用数学学会大会上作1小时报告；10多人入选美国数学会和美国工业与应用数学学会会士、全国优秀科技工作者、国家千人、新世纪百千万人才、国务院津贴专家、国务院学位委员会学科评议组成员等。一批毕业生入选其它国家、省部级人才计划，任国家重要学术机构、著名企业、高校负责人，曾有4人同时任中国科学院数学与系统科学研究院的院、所领导。近年来，有一批毕业生获全国优秀博士论文奖和提名奖、国际数值分析 Fox 奖、高被引科学家奖、中国工业与应用数学学会优秀青年学者奖、中国计算数学学会青年创新奖和青年优秀论文一等奖、陈景润未来之星、欧拉应用数学奖、宝钢优秀学生特等奖、省杰出青年基金、部省级教学科研成果奖等，或成为国内外名校教授及国家青年千人、教育部新世纪人才等国家、省部级人才。为配合国家“基础学科拔尖学生培养试验计划”培养更多拔尖数学人才和创新地方高校基础学科拔尖学生培养机制，学院率先于2014年开始结合学院实际和学科专业特色，组建了数学类韶峰班，并积极探索数学类创新人才培养模式：为韶峰班学生制定了“度身量造”的培养方案，并采用多元选拔、综合评价和动态进出的遴选机制。几年的实践已初步取得了良好效果：2014级韶峰班（19人）已有13人被一些科研院所预录取为免试研究生，其中3人被北京大学录取，4人被中国科学院录取，2人被北京师范大学录取，1人被北京计算科学研究中心录取；1人获全国数学竞赛一等奖。

数学与计算科学学院已形成了一批长期稳定的有特色的科研方向：偏微分方程数值方法，代数学和矩阵论，应用概率与应用统计，微分方程初值问题数值方法，计算流体和快速算法，信息处理，微分方程与动力系统，偏微分方程理论，分形几何与函数论及生物统计，优化与控制等。近年承担了国家自然科学基金重大研究计划重点支持项目、国家自然科学基金重点项目、国家科技重大专项课题等；获教育部、湖南省自然科学一等奖等一批部省级科研奖励，在SCI顶级期刊上发表一批学术论文，ESI高被引论文20多篇。

数学与计算科学学院拥有完善的计算机网络和先进的科学计算平台，搭建了IBM高性能科学计算集群（105个节点，40TFLOPS），并具有良好的办公条件和丰富的国内外图书资料。