



第一届解法器快速算法及应用研讨会

Solver2018回顾

2018.6.22-25, 湖南·湘潭·韶山

会议概况

Solver研讨会

- 关键词：实际应用、大规模计算、快速算法、解法器软件与性能
- 愿景：
 - 建立一个相互交流、相互支持的解法器社区；
 - 鼓励参会者分享解法器相关的问题，为参会者创造合作机会；
 - 激发学生对超大规模快速算法研究的兴趣；
- 形式：报告 + 问题讨论；
- 时间地点：相对固定
- 预期产出：解法器算法及应用进展报告、问题集、合作关系等

- 主办单位：
 - 北京应用物理与计算数学研究所
 - 湘潭大学
- 资助单位：
 - 湘潭大学数学与计算科学学院

Solver18

会议主题

- 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

组织者

- 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)
- 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

- 安恒斌 (北京应用物理与计算数学研究所)
- 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)
- 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)
- 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)

组委会、
程序委员会

Solver18

- 参会：93人
 - 来自国内外 33个单位，其中研究生 34 人
- 报告：23个
 - 12个 线性/非线性算法
 - 5 个 特征值算法
 - 4 个 软件与性能优化
 - 2 个 应用
- 主题讨论：5人共提交8个讨论问题

- 会议日程：
 - 6.22 下午：注册报到
 - 6.22 晚上：程序委员会会议 (到会成员14人 + 会议学术秘书1人)
 - 6.23 上午：开幕式 + 7个报告;
 - 6.23 下午：8个报告 + 问题讨论;
 - 6.23 晚上：文化活动;
 - 6.24 上午：8个报告 + Solver19计划;
 - 6.24 下午：自由交流;
 - 6.25：离会.

Solver18: 报告情况

- 工程计算中的线弹性问题快速算法
 - 安恒斌(北京九所)、蔡明超(Morgan大学)、冯春生(湘潭大学)、黄学海(温州大学)
- 特征值计算快速算法
 - 张硕(中科院)、徐飞(北工大)、游春光(中物院软件中心)、高兴誉(北京九所)、谢和虎(中科院)
- 预条件算法
 - 安恒斌(北京九所)、张晨松(中科院)、舒适(湘潭大学)、谷同祥(北京九所)、徐雪枫(中科院, 博士生)、徐小文(北京九所)、顾先明(西南财经)
- 性能优化与软件
 - 黎雷生(中科院)、王银山(中科院)、刘伟峰(挪威科大)、徐然(中物院软件中心)
- 新型算法及其他
 - 谌稳固(北京九所)、岳孝强(湘潭大学)、井浩(清华大学)、胡洋(清华大学)

Solver18: 主题讨论问题征集情况

- 谢和虎：2个关于特征值计算的 计算效率问题
- 张晨松：2个关于AMG算法的问题
- 徐小文：2个关于AMG算法的问题
- 刘伟峰：1个三对角求解性能优化的上界问题
- 舒 适：解法器交流平台建设
- 注：详细内容见“Solver问题集” (在会议网页上发布)

Solver18: 财务情况

- 费用开销：约13万
 - 会场、餐饮、交通、纪念衫、文化活动
- 费用来源：
 - 注册费：4万
 - 其他：由湘大数学与计算科学学院资助
- 免注册费用：40人

特别感谢：湘大数学与计算科学学院的支持！

会议现场

到达韶山





到达韶山



Solver18-第2天

开幕式



湘潭大学数学与计算科学学院舒适教授主持开幕式
湘潭大学数学与计算科学学院院长汤华中教授出席会议并致辞
北京应用物理与计算数学研究所徐小文研究员介绍会议情况

Solver18-第2天

合影



现场



Solver18-第2天

17

现场



交流



文化活动



交流



交流



交流



Solver18-第3天

交流



Solver18-第3天

会议结束，讨论Solver19



报告情况

Solver18-报告1

安恒斌：热-力-接触耦合应用的一类预处理方法

针对力学模型“薄结构”和纯剪切效应较弱的特点，设计基于算子层面的热-力-接触耦合预处理方法，克服直接采用代数多重网格预处理的Krylov子空间方法收敛速度慢的困难。该方法有效支持了天生桥模型11亿自由度的大规模数值模拟计算，该模拟结果可以解释该面板坝出现挤压破损的原因。



Solver18-报告2

张晨松: Preconditioning and Decoupling Methods for Multiphase Flows in Porous Media

考虑多孔介质中多组分流的全隐式离散方法，研究预理解耦方式。首先对不同的物理量分别做预处理，得到物理量耦合关系减弱的新线性系统，然后考虑用多步法求解。数值实验表明，该方法可有效减少线性解法器的迭代次数，从而使得非线性问题的求解时间明显减少。

Solver18-报告3

舒适：大波数Helmholtz方程带权PWLS法的自适应BDDC预条件子

针对大波数Helmholtz模型问题的带权平面波最小二乘（PWLS）格式，研究变分意义下的自适应BDDC方法，构造dual和primal基下的Schur补系统，所得预条件子可被角频率控制。对于光滑解、随机解和系数跳跃等情况的数值实验验证了该方法的有效性。



Solver18-报告4

Mingchao Cai: Fast solvers for models of fluid flow, linear elasticity and poroelasticity

该报告介绍Stokes问题、线弹性问题和孔弹性问题的一些快速算法。对于Stokes问题，针对向后Euler格式所得离散系统对应的鞍点问题，采用压力校正投影算法，构造有效的预条件。对于线弹性问题，考虑方程的混合形式有限元离散，并使用重叠型加性Schwarz方法构造预条件。对于孔弹性问题，采用向后Euler格式，使用Fourier分析推导Schur补，预处理后的矩阵条件数和物理参数、网格加密无关。

Solver18-报告5

冯春生：一种非定常线弹性问题的自适应并行算法

针对非定长线弹性模型，对时空方向分别采用有限差分 and 线性有限元离散，得到一种全离散隐格式，并分析该格式的收敛阶。基于系数矩阵的条件数估计，设计全离散格式的自适应快速算法；考虑网格质量对AMG-CG方法效率的影响，设计基于自适应网格优化的高效AMG-CG方法。



Solver18-报告6

黄学海: Fast Auxiliary Space Preconditioner for Linear Elasticity in Mixed Form

考虑线弹性方程Hellinger-Reissner混合格式，采用Hu-Zhang有限元离散并加入稳定化项，然后构造块对角预处理子。在Mesh dependent范数下可证明inf-sup条件。经预处理的线性系统条件数与网格尺寸和Lamé常数无关，因此使用GMRES方法求解时该方法可具有一致的收敛速度。



Solver18-报告7

谏稳固: Sparse solutions of underdetermined linear equations

考虑具有压缩感知背景的欠定线性方程组求解。这些线性方程组往往具有分块的稀疏结构，希望找出自由度最少的解。报告人介绍了优化算法、贪婪算法、阈值算法等一系列方法，并分析了阈值算法的并行实现。



Solver18-报告8

张硕: On the high-efficiency algorithm for fourth-order eigenvalue problems

针对双调和特征值问题，给出具有最优收敛阶的多重网格方法算法框架，以及相应的自适应算法。对于四阶微分方程，考虑降阶的方式，将微分方程写成混合形式，相应的Sobolev空间均为1次或0次，从而较方便地构造嵌套空间。当最粗层网格足够细时，该方法具有最优的收敛速度。



Solver18-报告9

徐飞: Parallel multilevel correction method for eigenvalue problems

对于微分算子特征值问题，将大规模特征值问题的求解转化为一系列边值问题和粗空间上小规模特征值问题的求解。不同的边值问题和粗空间特征值问题的求解可并行分别计算，且不同的特征对之间无需进行正交化等数据交换过程，因此该算法天然具有良好的并行可扩展性。



Solver18-报告10

游春光: Augmented Subspace Projection Methods for Eigenvalue Problems

针对代数特征值问题，从多重网格的粗空间可有效近似矩阵的低频信息出发，利用代数多重网格生成具有稀疏表示的子空间，降低子空间投影方法的存储和计算开销。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较大潜力。



Solver18-报告10

高兴誉: The preconditioning methods for the selfconsistent iteration in Kohn-Sham density functional theory

对于第一性原理计算中的特征值问题，利用Hamilton算子的不变有限群，使得微分算子可自然进行块对角分解。考虑inhomogeneous系统长程影响的自洽场迭代预处理格式，在配置预处理方法时自动区分金属和非金属材料，以提升非线性迭代的收敛性。



Solver18-报告12

谢和虎：一种求解特征值问题的广义共轭梯度方法

该报告将介绍求解特征值问题的一种简单稳定的共轭梯度方法。在算法实现时，尽量在子空间上做特征向量之间的正交化，以减少正交化的计算量；同时考虑避免正交化失败的手段，以提升稳定性。该方法在3万处理器核上成功求解出光机模态分析问题11亿自由度规模的前50个特征对。



Solver18-报告13

黎雷生：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

针对太湖之光主核+从核的处理器特点，结合常用的第一原理计算软件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。



Solver18-报告14

王银山：可自动调优的高性能稀疏矩阵算法库

介绍一个可自动调优的高性能稀疏矩阵算法库，以应对现代计算机体系结构带来的困难。算法库支持多种矩阵存储格式的自动选择，实现了MPI+X的编程范式，并对存储细节和通信细节进行隐藏。在性能优化方面，算法库针对稀疏矩阵运算kernel进行特殊优化，并尝试支持更多的应用层解法器以提升解法器性能。



Solver18-报告15

刘伟峰：稀疏三角方程的可扩展性分析

由于内在的串行特征，稀疏三角方程求解的并行化非常困难。在高度并行level set方法的基础上，提出Synchronization-free方法，以减弱level set方法预处理和同步等高成本开销。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。

Solver18-报告16

徐然：数值代数解法器JPSOL及其应用进展

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。重点介绍了JPSOL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。



Solver18-报告17

谷同祥：具有周期结构的大型稀疏线性方程组高效求解

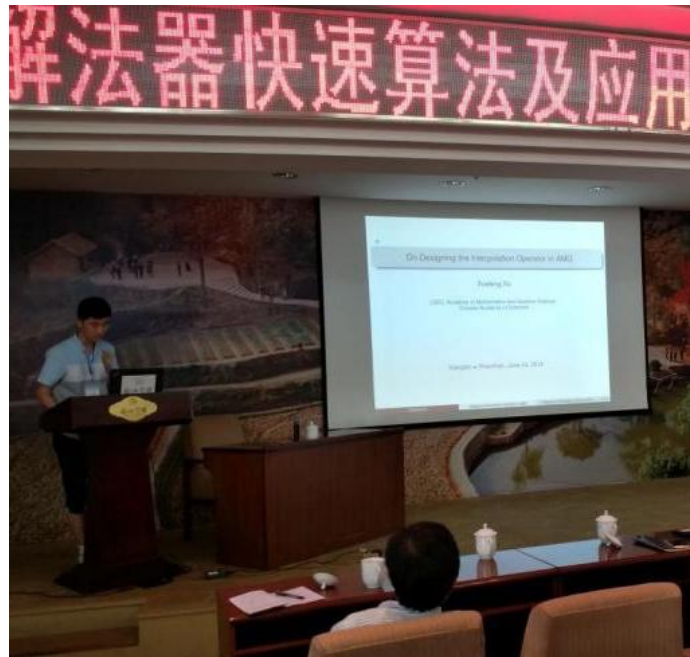
考虑对周期边界条件的扩散方程离散后所得周期线性方程组的高效预处理技术。给出周期矩阵的LU分解，并从理论上分析预处理子的性质。数值实验表明，对光滑系数、间断系数、单调格式等问题，该方法具有较好的预处理效果，对多级周期也有一定的启发意义。



Solver18-报告18

徐雪枫: On Designing the Interpolation Operator in Algebraic Multigrid Methods

在科学与工程计算中，代数多重网格作为预条件是否有效的关键在于是否构造出合适的插值算子。因此需要给出插值算子的定量估计。该报告给出一种理想插值算子的刻画方式，并分析其等价条件，进而可用于指导代数多重网格的实际设计。



Solver18-报告19

徐小文：解法器算法：实际应用离Poisson方程有多远

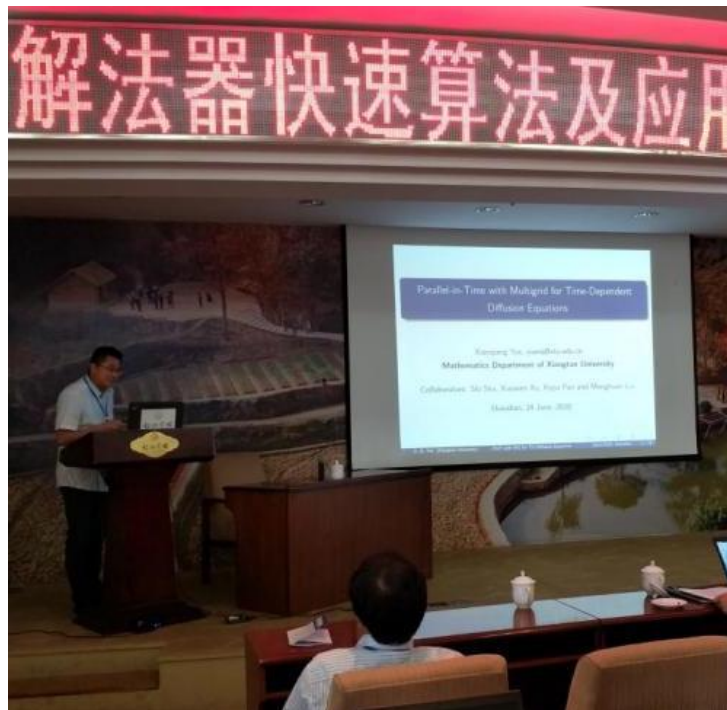
从国际超级计算机TOP500排行榜的三类基准考题HPL, HPCG, HPGMG出发, 提出“Poisson性能比”的指标, 可在一定程度上衡量实际应用复杂特征对现有解法器带来的难度。以激光聚变、结构力学等应用为例, 讨论面向复杂应用特征和超大规模计算的解法器算法设计空间, 并探讨若干值得关注的研究问题。



Solver18-报告20

岳孝强: Parallel-in-Time with SFVE Multigrid for Radiation Diffusion Equations

重点关注multigrid-reduction-in-time方法, 考虑时间尺度的多重网格, 给出一种FCF迭代格式, 提升时间积分问题的计算精度。对该格式的二网格分析表明, 误差具有最优的收敛阶。数值实验表明, 该方法具有良好的并行可扩展性。



Solver18-报告21

赵永良: A block bi-diagonal Toeplitz preconditioner for block lower triangular Toeplitz system from time-space fractional diffusion equations

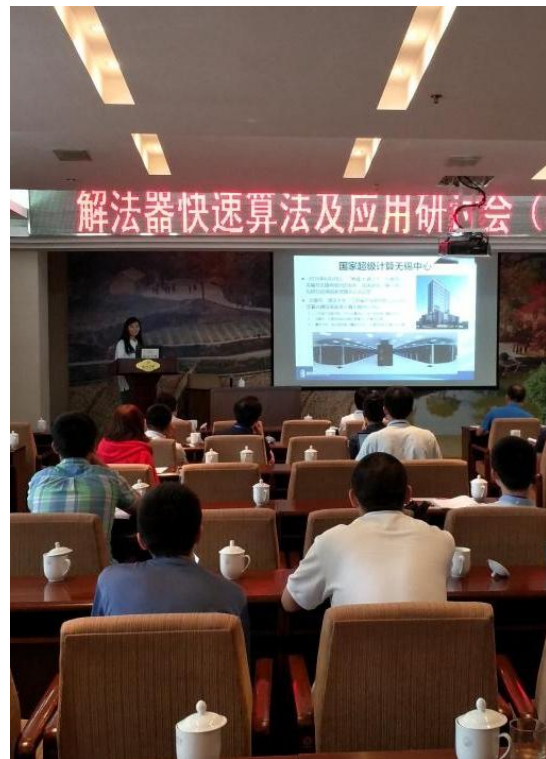
针对时空分数阶扩散模型，考虑time-marching格式有限差分方法的预条件策略，构造块 bi-diagonal Toeplitz 预处理子。进一步结合Toeplitz矩阵的性质和FFT方法，给出对于预处理方程的快速预处理求解方法。



Solver18-报告22

井浩：超越奈奎斯特频率的波动方程波数域优化方法

针对地震波成像及其应用中求解地震波方程的伪谱法和有限差分法的不足，该报告考虑波数域优化方法，采用空间算子近似，并利用Fourier变换将空间导数变换到波数域，然后用牛顿法求解，最终实现在低于Nyquist采样率的粗网格下有效进行数值模拟的目标。



Solver18-报告23

胡洋：不可压两相流动的保物理特性相场模拟方法

通过在相场界面追踪方程中引入合适的源项，提出一种能够保证伽利略不变性、系统总质量守恒和相体积守恒的模型，对时间步长的影响更小。在算法的实现层面上，采用介观尺度格子

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



感谢所有参会者！
Solver2019，昆明见！