



中国科学院软件研究所

杰出青年人才发展专项计划年度进展报告书

(2011 年度)

姓名	李会元	课题名称	计算科学中的若干关键数学问题研究
资助金额	150.00 万元	课题起止时间	2009 年 9 月-2014 年 8 月
资助类别	基础研究	所在部门	并行计算实验室
研究工作主要进展和阶段性成果（含论文、研究生培养等）			
研究工作主要进展 - 深入研究了三角形与四边形之间的坐标变换关系，尤其是其中把四边形的一顶点映射成三角形一中点的新坐标变换。我们揭示了它是一种多项式对称变换，在以往文献中用于构造二维的高斯求积公式；它把正方形上的张量积形式的 Jacobi 多项式变换为三角形上的正交无理函数，由此改善了求积节点的分布。我们研究了这组无理函数基底下的 Galerkin 谱和谱元方法，构造了其相应的 Nodal 型基函数并研究了配置谱方法，建立了这类新的谱方法的数值分析理论框架，得出了谱方法收敛性。 - 研究了二维六边形与三维十二面体的快速傅里叶变换(FFTH)在 GPU 环境下的并行算法。我们通过充分利用 CUDA 的层次化并行机制及其库函数，设计了高效率的 CUDA 算法并编制了相应 CUDA 程序，与 CPU 下串行程序相比，其加速比达到了 30~40 倍；在此基础上，我们通过研究 GPU 上分布式并行数据的转置与排序算法，优化设计了 FFTH 的 CUDA-MPI 算法，得到了理想的数值实验结果。FFTH 的 CUDA-MPI 算法研究和测试为大规模 CPU+GPU 异构计算机系统的可扩展新型算法的探索提供了参考。 - 研究了大腔体电磁散射问题的谱方法。该问题的数学模型为高波数的 Helmholtz 方程，其边界条件为带有高奇异积分的穿透性人工边界条件： $\begin{cases} \Delta u + k^2 u = f & \text{in } \Omega = [-1,1] \times [-2,0], \\ \partial_n u = Tu + g & \text{on } \Gamma = [-1,1] \times \{0\}, \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega, \Gamma, \end{cases}$ $(Tu)(t) = \frac{ik}{2} \int_{-1}^1 \frac{H_1^1(k x-t)}{ x-t } u(x,0) dx,$			

这里的积分为 Hadamard 有限部分积分。

我们得到了方程的稳定性结果,刻画了它与波数之间的显式依赖关系;采用第二类 Legendre 函数以及 Legendre-Gauss 插值方法来计算有高奇异积分,并在次基础上设计了方程的 Legendre-Galerkin 逼近格式;证明了谱方法逼近格式的稳定性与收敛性。数值实验结果证实了在本问题求解上谱方法的优越性。

- 研究了电阻抗断层成像的重构算法中 R-linear Beltrami 积分方程求解的谱方法:

$$\begin{aligned} f + (v_1 S + v_2 C) \bar{f} &= g \quad \text{in } \Omega, \\ Sf(z) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\Omega} \frac{f(w)}{(w-z)^2} dudv, \quad w = u + iv, \quad z = x + iy \in \Omega, \\ Cf(z) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\Omega} \frac{f(w)}{w-z} dudv, \quad w = u + iv, \quad z = x + iy \in \Omega. \end{aligned}$$

我们针对 Ω 为圆盘的情况,得到了 Beurling 积分变换 S 与 Cauchy 积分变换 C 的正交多项式展开级数表示及其谱方法计算方法;建立了 R-linear Beltrami 积分方程的谱方法逼近格式,完成了部分数值实验结果;相关数值理论分析工作尚在进行之中。

- 深入研究了 G_2 群下的 (二维) 傅里叶分析及其相应的 $30^\circ - 60^\circ - 90^\circ$ 三角形上的正交三角多项式。我们得到了平面上又一类的广义 Chebyshev 正交多项式,它们满足一类特殊的双参数 Sturm-Liouville 特征微分方程:

$$L_{\alpha, \beta} := -A_{11}(x, y) \partial_x^2 - 2A_{12}(x, y) \partial_x \partial_y - A_{22}(x, y) \partial_y^2 + B_1(x, y, \alpha, \beta) \partial_x + B_2(x, y, \alpha, \beta) \partial_y$$

其系数 A_{22} 为三次多项式而不是通常情况下的二次多项式。我们针对次特征问题定义了*-序以及相应的 m -次,证明了此特征方程在*-序下具有唯一的一组特征值与特征正交多项式。

- 由等边三角形、等腰直角三角形、 $30^\circ - 60^\circ - 90^\circ$ 三角形上已知的特征三角多项式出发,得到了任意三角形上 Dirichlet 边界条件下的 Laplace 微分算子的特征值之部分和的几何紧致估计,与以往结果相比,我们的结果不仅更为精确,也更能反映出特征值部分和对三角形几何量的依赖。
- 研究了列向液晶纤维的念珠模型的数值模拟谱方法。念珠模型的控制方程为一非线性耦合偏微分方程组,包括流体动力学方程、相场方程以及指向场方程。我们提出了求解此方程的一种高效的谱方法格式,并进行了二维数值模拟实验,得到了与物理实验相吻合的数值实验结果。目前,三维的并行算法和程序正在研制中。

参加会议

- A New Spectral Method on Triangles by Using the Square-to-Triangle Mapping. The Third Workshop on Recent Advances in Spectral Methods and Related Applications, Shanghai Normal University, July 15-16, 2011.
- 三角形上拉普拉斯算子特征值之部分和估计. 第九届全国计算数学会, 郑州大学, 2011 年 9 月 19-22 日.
- Fast Fourier Transform on Hexagonal Lattices. The Fourth International Conference on Computational Harmonic Analysis, City University of Hong Kong, May, 23-27, 2011.

论文情况

- A new spectral method on triangles, with Youyun Li, Li-LianWang and HepingMa, Lecture Notes in computational Science and Engineering: Spectral and High Order Methods for PartialDifferential Equations, 237-246, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2011.Legendre Spectral Galerkin Method for Electromagnetic Scattering from Large Cavity, Huiyuan Li ,Heping Ma and Weiwei Sun, Submitted to SIAM Journal on Numerical Analysis.
- Discrete Fourier Analysis and Chebyshev Polynomials With G2 Group, Huiyuan Li, Jiachang Sun, and Yuan Xu, Submitted to Journal of Advances in Applied Mathematics.
- 六边形区域快速傅里叶变换的 CUDA-MPI 算法及其实现, 陈家杰, 李会元, 张先轶. 数值数学与计算机应用, 已投稿.
- 非线性守恒律高阶谱粘性法的收敛性, 纪圆圆, 李会元, 应用数学与计算数学学报, 第 25 期第 2 卷, 2011 年 12 月.
- Numerical Investigation of the Dynamics of Drop Formation and Pitch-Off Using a Phase-Field Model for Two-Phase Complex Fluids, Xiaofeng Yang, M. Gregory Forest, Huiyuan Li, Chun Liu, Jie Shen, and Qi Wang. Submitted to Journal of Computational Physics.

研究生培养:

- 指导在读研究生三名。

国家项目争取:

- 成功申请到国家自然科学基金重大研究“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”计划之培育项目“非线性特征值问题的高性能谱方法研究”。

国际交流情况:

2011 年我们与境外同行开展了相关的学术交流与合作:

- Yuan Xu, University of Oregon
- Xiaofeng Yang, University of South Carolina
- Weiwei Sun, City University of Hongkong
- Xue-Cheng Tai, University of Bergen
- Jie Shen, Purdue University
- Qiang Du, Pennsylvania State University

下一年度工作计划, 包括国内外合作与交流计划

2012 年里我们将选优先择具有具体应用背景的研究方向, 开展相关研究工作。

- 谱方法研究。探索保持一定物理特性的谱方法与谱元方法, 发展基于多项式三角元的间断 Galerkin 方法, 发展三维列向液晶高分子数值模拟谱方法的 MPI 并行算法和程序。
- 非线性特征值问题。探讨非线性偏微分方程的特征值问题与定解问题求解方法的异同, 构造非线性特征值问题的高精度高效率的谱方法求解格式。
- 积分方程。深入研究了电阻断层成像的重构算法中 R-linear Beltrami 积分方程求解的谱方法, 完善谱方法求解算法和程序, 发展积分方程谱方法的数值分析理论框架。
- 晶格傅立叶分析。发展晶格快速傅立叶变换 (FFT) 的 GPU 并行算法, 研究 GPU 上相应的多项式快速变换算法。发展三维晶格傅立叶分析与正交多项式和 Sturm-Liouville 特征方程理论、构造相应的求积公式和插值算法。

拟开展的合作:

- 继续与本部门孙家昶研究员、美国俄勒冈大学徐源教授合作, 开展傅立叶分析、正交多项式、Sturm-Liouville 特征问题, 求积公式和插值的研究。
- 保持与本部门孙家昶研究员、美国宾夕法尼亚州立大学杜强教授的合作, 深入开展三角形、四面体上 Laplace 算子特征值之部分和研究, 揭示其与相关几何量、代数量间的定量关系。
- 与美国南卡大学 XiaofengYang 博士合作开展液晶高分子纳米材料三维模拟的谱/谱元方法的 MPI 可扩展性并行算法和程序研究。
- 加强同美国普度大学沈捷教授以及新加坡南洋理工大学王立联博士在谱/谱元方法方面的合作研究。

年度经费使用情况概要
2011年度项目拨款30万元。项目经费支出基本按计划进行，截止到11月底，累计支出60.28万元，扣除返还去年借支经费，年度实际支出20.3万元。其中研究经费支出约10.6万元，用于项目组举办学术报告，项目组成员获取文献资料、参加国内学术交流并购置计算实验所需的微机；国际合作与交流费支出约4.2万元，用于支付项目组成员出国（境）参加国际学术会议以及国际学术合作者来所访问交流；研究生的劳务费支出约3.0万元；特殊补贴2.4万元。
存在的问题、建议及其他需要说明的情况
无。

备注：1、杰出青年人才入选者应实事求是地填写此报告，禁止弄虚作假；
2、此报告作为专项计划跟踪、管理的主要依据，每年报送人力资源处；
3、此报告将在所网站对外发布。