



中国科学院软件研究所

杰出青年人才发展专项计划中期考核报告

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	支持周期	2009 年 9 月-2014 年 8 月
资助类别	基础研究	所在部门	并行软件与计算科学实验室

研究工作进展总体情况

(内容包括：已完成的科研目标、成果及其在该领域的应用和所处地位)

项目组在晶格傅立叶分析与快速傅里叶变换、新型高效能三角谱与谱元方法及其应用等方面取得了研究成果。具体内容有以下方面：

一、高效能谱和谱元方法

1. 提出了三角形区域上的完全张量积基底的有理谱和谱元素方法，用于 Poisson 方程、Helmholtz 方程等偏微分方程的高效数值求解。证明了该方法的谱逼近性质及其最优收敛阶，数值实验结果表明我们的方法简单，易于实现。相应论文发表于 SIAM Journal on Numerical Analysis, 已被引用 11 次。本研究成果已被国内外学者应用于非结构化网格谱元方法以求解流体力学中的 Navier-Stokes 方程。
2. 把完全张量积基底的有理谱和谱元素方法推广到四面体区域上，证明了该方法的谱逼近性质及其最优收敛阶，并用于 Poisson 方程、Helmholtz 方程等偏微分方程的高效数值求解。相应论文发表于 International Journal of Numerical Analysis and Modeling。
3. 应用 Sturm-Liouville 特征微分方程及广义 Koornwinder 正交多项式，得到了三角形区域上的代数多项式 L^2 和 H^1 正交投影逼近的最佳误差估计，并构造了 Poisson 方程和双调和方程的 Koornwinder 谱方法逼近格式，得到了其收敛性的最佳估计。本研究成果为任意单纯性上多项式逼近及谱方法的最近误差估

计奠定了基础。相应论文发表于Mathematics of Computation。

4. 构造了从矩形到三角形的一种新的坐标变换，它把矩形的一个顶点变成三角形的一个中点；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。由此提出了三角形上一类全新的谱方法。本研究的初步成果在谱和高精度国际会议上报告，并首先在会议论文集上发表。
5. 构造了新型三角谱方法的模态(modal)和节点(nodal)基函数,深入研究其相应的Galerkin谱和配点(collocation)谱方法，并发展了其对应的三角形谱元方法。我们设计了新型谱和谱元方法的有效便利算法,它只需对矩形上传统的张量积谱和谱元方法稍加修改即可。理论上，我们建立了这类新型谱方法的数值分析理论框架，得出了谱方法收敛性。相应研究成果即将发表于Numerical Algorithm。

二、 傅里叶分析、正交多项式与Gauss求积公式

6. 建立并完善了高维区域晶格(lattice)傅立叶分析、正交多项式与Gauss求积公式的理论框架。并在此框架下利用代数几何(反射群, 对称群等)建立了菱形十二面体和四面体上傅立叶分析理论, 建立了四面体上广义三角多项式并研究其性质, 建立菱形十二面体和四面体上的求积和插值公式, 其Lagrange基底具有非常紧致的表达式, 且Lebesgue常数具有最优阶 $O(\log^3 N)$ 。相应论文已发表于Mathematics of Computation, 被引用4次。
7. 首次应用晶格傅立叶分析方法研究了二、三维方形区域上Chebyshev多项式的Gauss型求积公式。中其二维情况下 $2n-1$ 次代数精度仅需要 $\frac{n(n+1)}{2} + \frac{n+1}{2} + 1$ 个积分点, 已基本达到求积点数的下界, 更重要的是通过研究得到了相应插值基函数(Lagrange基函数)的紧致表达式。对三维情况, 我们则首次得到了具有 $\frac{n^3}{4} + O(n^2)$ 个求积点、 $2n-1$ 次代数精度的Gauss型求

积公式，并给出了其相应插值基函数的紧致表达公式。相应论文发表于 *Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications*，被引用4次。

8. 在既有的二、三维研究成果之上，用晶格傅立叶分析方法深入研究了 d 维区域 A_d 晶格基本区域上的离散傅立叶变换、求积公式和差值，并通过对称群及齐次坐标等工具建立了 d 维单纯形上的求积公式和差值；通过类似于一维情况下的坐标变换，把三角函数变成曲面单纯形区域上的代数(广义 Chebyshev)多项式，并由此建立了代数多项式的 Gauss 和 Gauss-Lobatto 求积公式及其相应的差值理论，并给出了插值基函数的紧致表达公式。相应论文发表于 *Fourier Analysis and Application*，已被引用7次。
9. 研究了平面上基于空间-频率域上各类晶格组合的傅立叶变换，由对称性分析得出了仅有的三类三角形 ($60^\circ-60^\circ-60^\circ$ 、 $30^\circ-60^\circ-90^\circ$ 及 $45^\circ-45^\circ-90^\circ$)，其上的拉普拉斯特征方程具备初等解。重点探讨了 $30^\circ-60^\circ-90^\circ$ 三角形上的(特征)三角函数，并由此发现了二维新型 Chebyshev 多项式及相应的新型 Gauss 求积公式，拓展了 Gauss 求积公式的概念和理论。相应论文发表于 *Numerical Algorithm*。
10. 针对一类特殊的双参数 Sturm-Liouville 特征微分算子 $-\omega_{\alpha,-\beta} \nabla^T \omega_{\alpha,\beta} A \nabla$ ，定义了 $*$ -序以及相应的多项式次数，证明了此类特征方程在 $*$ -序下具有唯一的一组特征函数，由此定义了平面上的一类双参数广义 Jacobi 正交多项式，在 $\alpha, \beta = \pm \frac{1}{2}$ 的情况下它们即为 $30^\circ-60^\circ-90^\circ$ 三角形所对应的新型 Chebyshev 多项式。必须指出的是，这里的系数矩阵 A 中的元素 A_{22} 为三次多项式而不是通常情况下的二次多项式。这一点在以往的文献中是没有遇到的。相应研究成果已投稿到 *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*。

三、快速傅里叶变换的算法

11. 设计并实现了平行六边形区域上的非均匀节点快速傅立叶变换的算法，把非

均匀节点离散傅立叶变换的计算复杂度由原来的 $O(N^4M)$ 降为 $O(N^2 \log N + M)$ 。由此拓宽了FFT及谱方法的适用范围。相应论文已发表于数值计算与计算机应用。

12. 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。与相同数据规模下的FFTW MPI并行程序相比,我们的FFTH CUDA-MPI程序的加速比达到了2.5倍以上。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。相应研究成果已发表于数值数学与计算机应用。

四、谱方法的高性能计算应用

13. 研究了复杂两相流中的列向液晶念珠模型的数值模拟的谱方法。念珠模型的控制方程为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,得到了与物理实验十分吻合的数值实验结果。本研究成果即将发表于Journal of Computational Physics。目前,三维的大规模并行算法和CUDA-MPI程序正在研制中。
14. 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,这种高波数、高奇异问题的数值计算方法研究十分具有挑战性。我们首先应用傅里叶分析得到了方程的稳定性结果,刻画了方程的解与波数之间的显式依赖关系;采用第二类Legendre函数来离散计算奇异积分,并在此基础上设计了方程的谱方法逼近格式;证明了谱方法逼近格式的稳定性与拟最优收敛性。数值实验结果表明,本方法在波数高于1000的情况下依然精确有效,证实了谱方法同有限元、差分等的低阶方法在本问题求解上的优越性。本研究

成果即将发表于SIAM Journal of Numerical Analysis。

15. 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。针对区域为圆盘的情况,得到了高奇异的Beurling积分变换与Cauchy积分变换的正交多项式展开级数表示及其高精度计算方法;建立了R-linear Beltrami积分方程的谱方法逼近格式。相应成果正在整理之中。

发表学术论文论著情况

- A triangular spectral element method using fully tensorial rational basis functions, Jie Shen, Li-Lian Wang, Huiyuan Li. SIAM Journal on Numerical Analysis, 47(3), 1619-1650, 2009. doi: 10.1137/070702023.
- Cubature formula and interpolation on the cubic domain, Huiyuan Li, Jiachang Sun, and Yuan Xu. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications. 2(2), 119-152, 2009.
- Discrete Fourier analysis on a dodecahedron and a tetrahedron, Huiyuan Li and Yuan Xu. Mathematics of Computation, 78(266), 999-1029, 2009. doi: 10.1090/S0025-5718-08-02156-X.
- Chebyshev-Legendre spectral method for solving the two-dimensional vorticity equations with homogeneous Dirichelte conditions, Hua Wu, Heping Ma and Huiyuan Li. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 25(3), 740 -755, 2009. doi: 10.1002/num.20371.
- 平行六边形区域非均匀节点快速傅立叶变换, 李明亮, 李会元, 孙家昶. 数值计算与计算机应用, 30(1), 58-69, 2009.
- Discrete Fourier analysis on fundamental domain of Ad lattice and on simplex in d-variables, Huiyuan Li and Yuan Xu. Journal of Fourier Analysis and its Applications, 16(3), 383-433, 2010. doi: 10.1007/s00041-009-9106-9.
- Optimal error estimates in Jacobi-weighted Sobolev spaces for polynomial approximations on the triangle, Huiyuan Li and Jie Shen. Mathematics of Computation, 79, 1621-1646, 2010. doi: 10.1090/S0025-5718-09-02308-4.

- Discrete Fourier analysis with lattices on planar domains, Huiyuan Li, Jiachang Sun and Yuan Xu. Numerical Algorithm, 55(2-3), 279-300, 2010. doi: 10.1007/s11075-010-9388-7.
- A new spectral method on triangles, Youyun Li, Li-Lian Wang, Heping Ma and Huiyuan Li. In Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 237-246, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2011.
- A spectral method on tetrahedra using rational basis functions, Huiyuan Li and Li-Lian Wang, International Journal of Numerical Analysis and Modelling. 7(2): 330-355, 2010.
- 一类非张量积区域快速傅里叶变换算法在国产并行机上的可扩展性测试, 余元、张云泉、李会元. 数值计算与计算机应用, 31(2), 123-130, 2010.
- 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卷第2期, 2011年12月.
- 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, 第33卷第1期, 2012年3月.
- Numerical investigation of the dynamics of drop formation and pinch-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. Journal of Computational Physics, to appear.
- Legendre spectral Galerkin method for electromagnetic scattering from large cavity, Huiyuan Li, Heping Ma and Weiwei Sun, SIAM Journal on Numerical Analysis, to appear.
- A new triangular spectral element method I: implementation and analysis on a triangle, Michael Daniel Samson, Huiyuan Li, Lilian Wang, Numerical Algorithms, to appear.
- Discrete Fourier analysis and Chebyshev polynomials with G2 group, Huiyuan Li, Jiachang Sun, and Yuan Xu, submitted to Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications, 8 (2012), 067.
- 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卷第2期, 2011年12月.

外部经费争取情况	
• 面向复杂区域和高维问题的谱方法研究，主持，23万元，国家自然科学基金面上项目，2010.1-2012.12。 • 非线性特征值问题的高性能谱方法研究，主持，70万元，国家自然科学基金重大研究计划“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”之培育项目，2012.1—2014.12。	
获表彰奖励情况	

无

经费使用情况

项目经费支出基本按计划进行，截止到2011年底，累计支出60.28万元。个人实际支出41.4万元。其中研究经费支出约21.8万元，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9.0万元，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5.0万元；特殊补贴5.6万元。2012年度项目经费支出尚未统计。

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，报送人力资源处；
3、此报告将在所网站对外发布。