·研究进展·

科学与工程计算的方法和应用

——基于国家自然科学基金创新研究群体项目研究成果的综述

曹礼群　陈志明*　许志强　袁亚湘
张林波　郑伟英　周爱辉

（中国科学院数学与系统科学研究院，北京 100190）

［摘　要］ 本文基于“科学与工程计算的方法和应用”国家自然科学基金创新研究群体项目的研究成果，系统综述了新型计算方法与理论研究、材料科学中的多尺度计算、面向复杂系统的电磁流体自适应计算、并行自适应有限元软件平台及其应用等方面的研究进展。

［关键词］ 子空间方法；稀疏逼近；多尺度建模；自适应；并行计算

科学与工程计算利用先进的计算能力解决复杂的科学工程问题，它综合了建模、算法、软件研制和计算模拟，是计算机实现其在高科技领域应用的必不可少的纽带和工具，计算、理论和实验一起已经成为当今世界科学技术创新的主要方式。“科学与工程计算的方法与应用”创新研究群体项目面向国家需求，以科学计算的学科前沿为导向，在“新型计算方法与理论研究”、“材料科学中的多尺度计算”和“面向复杂系统的电磁和流体的自适应计算”等三个方面开展了系统的研究，取得了一系列重要成果。

1　新型计算方法与理论研究

1.1　优化问题的子空间方法

优化问题指在一定约束条件下求解函数的极值，在实际中有广泛的应用。许多优化问题通常是大规模的，变量个数往往达到千万甚至上亿级别，因此研究求解大规模优化问题的快速方法非常重要和迫切。以往求解非线性优化问题的基本做法是将非线性问题线性化或二次化，在每次迭代中用简单问题代替复杂问题，但超大规模线性问题的求解依然非常困难。子空间方法是处理大规模线性问题的成熟算法，而对于非线性优化问题，利用子空间的思想来分析和研究则可追溯到 Stoer 和袁亚湘在 20 世纪 90 年代初对非线性共轭梯度法的子空间研究。近年来，我们对非线性优化的子空间方法开展了系统而深入的研究。

对于非线性方程组和非线性最小二乘问题，我们给出了子空间方法的一般形式[1]，其基本思想是每次迭代时方程的变量空间和取值空间都用子空间逼近，构造线性逼近问题。该方法推广了线性方程组求解的子空间方法。根据 Crammer 和 Singer 等人的多类 SVM 模型，机器学习中的多类分类问题可归结于特殊的优化问题，其对偶问题是超大规模的二次规划问题。我们利用子空间的思想[2]，提出了一个求解该问题的并行算法，将问题的变量空间分解成子空间并在每个子空间上并行地更新变量。

对于等式约束优化问题，我们提出了 Powell-Yuan 方法的子空间形式[3]，并证明了 Celis-Dennis-Tapia 信赖域子问题具有子空间性质。子空间形式的 Powell-Yuan 方法在每次迭代比原始的 Powell-Yuan 方法计算量小，数值结果亦表明子空间形式的 Powell-Yuan 方法改进了原始的 Powell-Yuan 方法。针对复合优化问题，我们提出了一个利用 Armijo 搜索的并行算法[4]，在每个子空间上独立（并行）计算该子空间的步长，然后将所有子空间的步长求和，再进行线搜索。我们在理论上证明了算

收稿日期：2017-05-08；修回日期：2017-06-23

* 通信作者，Email：zmchen@lsec.cc.ac.cn

法所取步长要优于传统的分解算法,数值结果也表明了算法的有效性。

1.2 高频波的快速算法

高频波散射问题的高效计算是公认的科学计算困难问题。一方面,数值方法的网格尺寸必须与频率相匹配才能得到满意的逼近误差,使得离散系统的规模非常大。另一方面,问题的波动性质使得离散系统不具有正定性。自从 1991 年法国学者 B. Despres、前苏联学者 V. V. Dhaidurov 和 E. I. Ogorodnikov 提出 Helmholtz 方程的 Schwarz 型区域分裂算法以来,Helmholtz 方程的高效快速算法一直受到国内外许多著名学者的关注。2010 年在英国杜伦市(Durham)举行的《多尺度问题的数值分析》国际会议上,区域分解领域著名学者 M. Gander 做了题为"为什么经典迭代方法解 Helmholtz 问题是困难的"的学术报告,全面总结了 Helmholtz 方程计算的困难及其进展。

2011 年,B. Engquist 和 L. Ying 提出了 Helmholtz 方程的移动完美匹配层方法(PML)扫描算法。受此启发,我们提出了一种求解 Helmholtz 方程的新型区域分裂算法,波源转移区域分裂算法(Source Transfer Domain Decomposition Method, STDDM)[6-8]。该方法把原问题的计算区域分成一系列层状区域,通过设计波源转移算法,把波源一层层地等价转移,在最后一层的解只依赖于最后二层的等价波源,可以用 PML 方法解出,而一旦得到原问题在最后一层的解,便可以通过设计一个波展开算法,利用等价波源逐次得到前面每一层中原问题的解。我们基于 PML 方法的误差分析理论,证明了这个算法的计算量正比于小区域的个数乘以每个小区域的计算量,达到了区域分裂方法的理想计算复杂性要求。我们的算法作为 GMRES 方法的预条件子对变波数问题得到了满意的计算结果。我们将波源转移算法进一步推广到求解弹性波问题[8]。

1.3 反散射问题的直接成像方法

反散射问题在雷达成像、石油勘探、医学成像和无损探伤等领域具有广泛应用。经典的求解反散射问题的方法基于数据拟合的优化模型,具有非线性、非凸、非光滑和病态等一系列困难。近年来,在计算中不需要迭代的反散射问题的直接成像方法得到越来越多的重视。逆时偏移成像方法(Reverse Time Migration)就是一类求解反散射问题的直接成像方法。该方法在计算中不需要迭代并且不依赖于散射体的物理性质,自上世纪 70 年代提出以来在石油勘探领域中得到广泛应用。

1971 年地球物理学家 J. F. Claebout 提出基于单程波方程的第一个逆时偏移成像算法。1983 年石油工程界多位学者各自独立地提出基于波动方程的逆时偏移成像算法。长期以来,地球物理界对逆时偏移成像算法的理论分析常常依赖于几何光学近似的假设,不能完全解释该类方法在实际应用中的效果。另一方面,物理学家 M. Fink 和应用数学家 H. Ammari 等学者针对小散射体,对时逆现象和逆时偏移成像算法进行了大量研究。近年来,我们对逆时偏移成像方法的数学基础进行了较为深入的系统研究,取得了一系列成果。

针对时谐声波反散射问题,我们建立了逆时偏移成像方法不依赖于小散射体或几何光学近似假设的全新的数学分析方法,在此理论分析的基础上提出了一个新的逆时偏移成像算法[9]。我们证明了新的成像函数一定非负,从而具有良好的稳定性性质,特别是对于噪声数据具有很好的健壮性。这是反散射问题的逆时偏移成像方法提出 40 多年来的第一个一般性的数学理论成果,这一理论上的突破使得我们对三维电磁反散射问题[10]、弹性波的反散射问题[11]、声波波导有限孔径反散射问题[12]和无相位数据的反散射问题等一系列困难的反散射问题提出了全新的直接成像方法。

无相位数据的反散射问题在雷达成像、衍射光学等领域中具有广泛的应用需求,得到工程界和许多著名应用数学学者如 G. Papanicolaou、H. Ammari 等的关注。长期以来对这类问题的计算方法是基于优化模型的迭代方法。我们基于对逆时偏移算法的理论研究,提出声波和电磁波无相位数据反散射问题的全新的逆时偏移直接成像方法,证明了新算法的成像结果对远场数据渐近等价于全相位数据的逆时偏移算法的成像结果,为无相位数据的反散射问题的计算方法开辟了新的研究方向[13-14]。

针对地球物理应用中的半空间中时谐声波反散射问题,我们引入了半空间反散射问题的点扩散函数(Point Spread Function),证明了它和全空间反散射问题的点扩散函数具有相似的性质,在此基础上建立了在地球勘探中得到广泛应用的逆时偏移成像方法不依赖于小散射体或几何光学近似的假设的数学基础,在高频近似的假定下建立了该成像方法的

新的物理意义，从而得到了散射体仅在被照射部分可以被探测到的数学解释[15]。

1.4　稀疏信号恢复

现实世界中的信号通常具有一定的稀疏性，即在合适的基底展开下的非零系数较少。利用这种稀疏性，人们可用较少的观测对信号进行重建。而依此所形成的新的研究方向称为压缩感知[16-17]。我们针对确定性采样点的设计及无相位观测下的压缩感知开展了研究。

压缩感知中采样方法的设计是一个关键问题。文献中主要采用随机采样方法设计采样点，而工程中确定性采样在使用上更为方便。我们采用数论中的 Weil 指数和定理，设计了多变量三角多项式确定性采样方法，并证明了该采样方法的最优性[18]。对于随机微分方程的数值求解，我们将上述确定性采样方法扩展到切比雪夫多项式稀疏逼近情形和最小二乘情形[19,20]。借助有限域中的 Katz 指数和定理，我们将上述采样方法扩展到单变量三角多项式情形，并证明了确定性选行方法的最优性。数值实验表明，我们提出的确定性选行方法优于文献中流行的随机方法。

在工程应用中，人们往往只能得到无相位观测值，因此利用无相位观测对稀疏信号进行恢复是一个在理论和应用中均有重要意义的研究问题。我们首先研究了最小观测次数问题[21]，将压缩感知中经典的 RIP 性质扩展到无相位观测情形，提出了强 RIP 性质的定义[23-24]，并在观测矩阵满足强 RIP 性质和无相位观测的条件下，证明可用 L1 最小恢复稀疏信号。此外，我们将压缩感知中基本的零空间性质扩展到无相位观测情形。低秩矩阵恢复是无相位恢复的一个扩展形式。我们进一步研究了低秩矩阵恢复问题，特别是恢复一个秩不超过 r 的矩阵所需的最小观测次数。对于该问题，Eldar-Needell-Plan 猜想为：恢复一个秩不超过 r 的 n 阶矩阵至少需要 4r(n-r) 次观测。我们对复情形证明了 Eldar-Needell-Plan 猜想成立，对实情形则通过一个反例表明该猜想对实矩阵并不成立[22]。

稀疏插值是逼近论中的经典研究课题。我们首先建立了稀疏插值的理论框架[19]，并研究了 k-稀疏插值所需最小插值点个数，同时给出了 k-稀疏插值函数存在的充要条件。针对切比雪夫多项式基底所构成的线性函数空间，我们构造了确定性稀疏插值点，并证明了该类插值点的优良性质。这些研究在经典逼近论与稀疏信号恢复之间建立了桥梁，并可用于随机微分方程数值求解。

2　材料科学中的多尺度计算

2.1　复合材料与界面纳米结构热传输问题的跨尺度模型与算法研究

以碳纤维增强复合材料、陶瓷基复合材料为代表的先进结构材料具有高强度、耐腐蚀、耐高温等优异的物理力学性能，是各类航空、航天飞行器的关键材料。开展相关材料制备技术、实验检测、性能预测和一体化设计等方面的研究有重要的意义。大量的实验检测结果表明：在宏观复合材料之间存在纳米尺度的界面相，其厚度在几个纳米到几百个纳米不等，而界面对于复合材料的力、热、电、磁等物理特性有十分重要的影响，复合材料界面科学与工程已成为重点研究领域。实验结果表明，基于傅里叶定律或非傅里叶定律的宏观连续热传输模型已不能准确刻画纳米界面的热阻现象。复合材料纳米界面的热阻现象造成界面附近过高的残余热应力，是诱导界面处空位、位错、微裂纹等缺陷产生的主要根源之一，其研究对于揭示材料的损伤与破坏的微观机理有重要的指导意义。

材料的物理尺度可粗略地划分为：微观尺度(电子、原子尺度)、介观尺度(分子、纳米器件尺度)、宏观尺度(微米以上结构尺寸)。针对宏观复合材料与界面纳米结构的热传输问题，物理实验结果表明统一的连续模型(如抛物型方程、C-V 模型、双相延滞模型等)已不能准确预测纳米界面处的实际温度，而精细的分子动力学模型或量子力学第一性原理方法则因计算规模太大而无法实现。因此，发展可靠的宏/介/微观相耦合的跨尺度模型和高效能算法、突破算法实现中的关键技术，是解决上述问题的必然趋势。我们在复合材料与界面纳米结构热传输问题跨尺度模型与算法方面的主要研究进展有：(1) 实现了纳米结构导热系数等热学参数的分子动力学计算和量子校正；(2) 发展了复合材料和多孔材料周期和随机结构热传输连续模型的多尺度算法；(3) 提出了一类分子动力学(MD)与连续介质跨尺度模型和分子动力学与有限元(FEM)跨尺度耦合算法；(4) 实现了三维复合材料和界面纳米结构的 MD/FEM 跨尺度计算。这些工作的主要创新点包括：(1) 我们的分子动力学与连续介质跨尺度模型是基于连续模型发展的，能够实现三维复合材料和界面纳米结构的跨尺度计算，而前期所有相关的研究工作都是基于原子模型发

展的，这些方法受计算能力的限制难以实现三维复合材料结构的跨尺度计算；（2）提出了分子动力学与连续模型间新的参量传递模式；（3）给出了跨尺度模型与算法的数学证明[25]。

为了验证我们提出的 MD/FEM 跨尺度算法的有效性，我们在复合材料周期结构一个周期单胞上采用 MD 方法求得的温度函数视为参考解，分别利用我们发展的 MD/FEM 方法、基于连续模型的多尺度渐近展开方法和基于连续模型的有限元方法进行了数值计算。我们发展的 MD/FEM 耦合算法与 MD 方法的数值结果十分接近，但计算量远远小于 MD，而基于连续模型的数值结果与 MD 方法相比在界面处可产生 20％的误差。这些结果表明 MD/FEM 跨尺度算法是十分必要和有效的。

2.2 纳米材料与量子器件电磁光特性的跨尺度模型与算法研究

当材料和器件的几何尺寸和电子波长可以比拟时，量子效应则不可被忽略或将成为主导的效应，而基于量子效应的新型微电子、光电子和磁电子器件制备技术近年来得到了长足的发展。探讨维度如何影响材料的电子态密度和材料的电磁光特性，提出纳米材料和量子器件新的理论和算法是计算数学及交叉领域的一个重要的研究方向。

物质场和电—磁—光场的相互作用有着十分丰富的物理内涵和广阔的应用前景。描述电磁特性有三个层次的物理和数学模型：（1）全量子模型：量子电动力学（QED），如物质（或粒子）采用二次量子化模型，电磁场采用量子化模型，例如，Yang-Mills 规范场和 Chern-Simons 规范场构建了粒子基本的物理和数学结构；（2）半量子化模型，物质或粒子采用量子力学模型，如非相对论 Schrödinger 方程和相对论 Dirac 方程，电磁场采用经典力学意义下的 Maxwell 方程组；（3）采用经典力学意义下的微观或宏观 Maxwell 方程组。经典的 Maxwell 方程组已难以准确描述上述低维度系统和量子器件的电、磁、光特性，不能揭示光子的吸收、发射和能级跃迁的物理本质。全量子模型对于刻画纳米材料和低维系统的量子效应是十分准确的，但求解量子化的模型，特别对于含缺陷和多组化学元素的复杂体系，则面临实际能计算的规模较小、收敛慢（甚至不收敛）等本质困难。最近十多年来，基于半量子模型，如 Schrödinger-Poisson 系统、Maxwell-Schrödinger 系统、Maxwell-Dirac 系统，针对场效晶体管、半导体激光器、拓扑绝缘体等纳米材料和量子器件开展数值模拟已成为相关领域的研究热点之一。然而，由于它们是强间断、时—空多尺度的非线性耦合系统，因此相关问题的数学文献很少。

我们针对非均质纳米材料与半导体量子器件载流子输运和带间光子跃迁问题，提出了有效质量近似的微观 Schrödinger 方程和宏观静电学 Poisson 方程非线性耦合系统的均匀化和多尺度方法。主要研究进展包括：（1）发展了具有周期间断系数 Schrödinger-Poisson 系统的均匀化和多尺度方法，给出了严格的收敛性分析，这是到目前为止这方面唯一的数学结果[26]；（2）提出了多尺度有限元算法，得到了这一非线性耦合系统多尺度有限元算法的收敛性[29]。

为了验证所提出的跨尺度算法的有效性，我们进行了数值模拟。由于难以找到具有周期间断系数 Schrödinger-Poisson 非线性耦合系统的解析解，我们以细网格上的有限元解为参考解，并基于我们提出的均匀化和多尺度方法，分别计算得到均匀化解以及一阶和二阶多尺度解。数值试验结果验证了我们提出的跨尺度算法的正确性和有效性。

在材料计算多尺度模型和算法方面，我们还研究了复合材料周期结构含时 Maxwell 方程组[27]、辐射传热[28]、热—力耦合[29]、Steklov 特征值问题[30]、优化设计[31]和最优控制[32,33]等问题的多尺度算法和收敛性。

2.3 电子结构计算的模型与方法

虽然第一原理电子结构计算取得了巨大成功，但如何从数学角度理解电子结构模型的合理性与计算的可靠性和有效性，如何利用高性能计算机又快又好地计算大规模体系，依然是极具挑战的重要课题。我们从建立数学理论与创新算法角度开展了基于密度泛函理论的电子结构模型的合理性与高效计算的可行性、可靠性和有效性研究。

密度泛函理论基础是 1964 年建立的 Hohenberg-Kohn 定理：体系的基态电子密度分布与体系所处外势场有一一对应关系（除可加一个无关紧要的任意常数以外），从而完全确定体系的所有性质。但在我们给出 Coulomb 体系的 Hohenberg-Kohn 定理严格的数学证明[34]之前，所见到的典型文献中 Hohenberg-Kohn 定理的证明均不严格、有关键缺陷。这些证明直接或间接地假设电子波函数不可能在一个正 Lebesgue 测度集上为零，或电子密度大于零，或电子密度泛函 Gâteaux 可微。前两个假设是否成立未被证明，而第三个假设确定不成立。我们

的工作为基于密度泛函理论的电子结构模型与计算的科学完整性填补了一个数学基础。

第一原理电子结构计算使用最广泛的是基于密度泛函理论的 Kohn-Sham 模型。不管是采用全势计算还是赝势计算，Kohn-Sham 轨道在离子实内部剧烈振荡，而在远离离子实的区域则变化缓慢。因此，采用自适应有限元离散非常自然也非常必要，因为这样能用较少自由度得到高计算精度，且精度随着网格加密而系统提高。

自适应有限元算法自上世纪 70 年代问世以来就广泛应用于科学工程计算，取得了巨大成功，相应数值分析也一直是国际学术热点。微分方程源问题的自适应有限元算法的相关研究始于上世纪 70 年代，现已相当系统深入。相比之下，特征值问题的自适应有限元算法的相关工作则极少。例如对于单特征值问题，相应的自适应算法的收敛率和复杂度分析的首个工作直到 2008 年才由我们发表。而涉及重特征值问题自适应有限元算法的工作则只有少数几项。

针对一类二阶椭圆算子重特征值问题，我们构造了有限元离散的后验误差估计子，给出了上下界估计，得到了相应的自适应算法，并证明了该算法具有最优收敛率与最优复杂度[35]。这是首个关于重特征值问题自适应有限元收敛率与复杂度的工作，它也为设计与理解电子结构自适应有限元算法提供了基础。

针对包括 Kohn-Sham 方程在内的电子结构计算的数学模型的一般的有限维离散，在合理的条件下，我们证明了所有有限维逼近都收敛到体系的基态，某些基态的有限维逼近还具有最优逼近性[36]。进一步，我们构造了有限元离散的后验误差估计子，给出了其上下界估计，设计了相应的自适应有限元离散算法，并在合理的条件下证明了：自适应有限元解都收敛到基态，一些解还以线性收敛率收敛到某个基态，且计算复杂度最优[37-38]。我们的后验误差分析回答了量子物理学家及量子化学家非常关心的计算结果的可靠性与有效性问题，为几类传统与创新的电子结构计算方法的合理性与有效性提供了数学依据。

通过不断引入自己的研究成果，我们完善和发展了第一原理实空间并行自适应计算程序 RealSPACES(Real Space Parallel Adaptive Calculation of Electronic Structure)[39]。该程序基于 PHG 平台，具备多个功能模块：赝势计算——目前能有效计算上千原子的体系，全势计算——目前能有效计算数百原子的体系，结构优化等。有限元基函数的局域性使得 RealSPACES 的可扩展性优于使用非局域基函数离散的程序。

我们提出了并行轨道更新算法并将之引入 RealSPACES[39]。该算法通过将大规模特征值问题分解为一系列相互独立的源问题以及一些几乎对角的小规模矩阵特征值问题，降低了计算量。更重要的是该算法具有天然的两层并行结构，因而使得 RealSPACES 计算效率及可扩展性大大提高。初步测试表明，随着体系的增大，引入并行轨道更新算法后的 RealSPACES 全势计算速度已与全势计算软件 Gaussian09 越来越接近直至更快。RealSPACES 具备的高精度和高扩展性特点使得它在大体系高精度全势计算中的优势尤为突出。并行轨道更新算法的引入已使得 RealSPACES 在天河 2 号上成功将全势计算扩展到数万个 CPU 核。我们还将该算法应用到基于平面波离散的第一原理计算著名开源软件 Quantum-ESPRESSO 中。数值实验表明，该算法对突破平面波离散在大规模并行计算上的局限有很好的前景。

3　复杂系统的电磁和流体的自适应计算

3.1　并行自适应有限元软件平台及其应用

PHG 平台(Parallel Hierarchical Grid，http://lsec.cc.ac.cn/phg)是我们自主研制的一个并行自适应有限元软件平台，其主要特征包括：(1) 基于单元二分、嵌套的的四面体协调网格并行自适应加密和放粗；(2) 支持 h-p 自适应；(3) 支持大规模并行和动态负载平衡；4)提供灵活的线性代数求解器及预条件子[40]。PHG 平台的主体代码以开源方式在互联网上公开发布，供科研和软件开发人员免费使用。在创新群体项目实施期间(2011—2016)，围绕 PHG 平台的研制及应用开展的主要工作包括针对国产超级计算机的体系结构特征对 PHG 平台进行重构和性能优化，以及与群体其他成员合作基于平台发展自适应有限元算法、研制并行自适应有限元程序。

在平台重构、性能优化及功能扩展方面，我们优化了数据通信及动态负载平衡模块，实现了对 MPI＋OpenMP 两层并行、Intel Xeon Phi 众核加速卡和国产申威众核处理器等的支持，优化了平台的底层通信模块，增加了对多种浮点(单精度、双精度和扩展精度等)和整数(32 位、64 位等)类型的支持，大幅

提升了 PHG 平台的并行可扩展性和对不同类型应用问题的适应性。我们研究了非结构自适应网格的动态负载平衡相关技术，包括 Hamilton 路径、Hilbert 空间填充曲线及多层次的网格划分技术等[41]；研制了 h-p 自适应模块，发展了 h-p 自适应有限元算法[42]；发展了 PHG 平台的六面体版本，并应用于地震波谱元 PML 数值模拟[43]。

在 PHG 平台的应用方面，我们与群体成员及复旦大学同行合作，基于平台发展了多个并行自适应应用程序，取得了一批应用成果，包括：集成电路互连线寄生参数提取算法和程序，可用于集成电路设计中高频三维复杂互联结构的参数提取计算[44]；第一原理密度泛函理论自适应有限元/有限体积实空间电子结构并行计算软件包 RealSPACES，该软件包基于创新的并行轨道更新算法，已经能够使用上万核开展包含上百原子的体系的全势计算[39]；半导体方程漂移扩散模型非结构网格上的有限体积和有限元格式并行自适应计算程序[45]；离子通道连续模型并行自适应有限元模拟器 iChannel 等，并获得了一些实际通道的数值模拟结果[46-53]等。

在创新群体项目实施期间，我们完成了 PHG 平台到主要国产超级计算机包括天河 1A、天河 2 号和神威太湖之光等的移植、安装，并开展了大规模并行计算测试。目前，基于 PHG 平台已经可以实现数千进程、数万处理器核的自适应计算，以及数十万进程、数百万处理器核的非自适应计算。下表是采用我们所发展的弹性波 PML 谱元并行程序在当前排名世界第一的神威太湖之光超级计算机上得到的一组测试结果。该程序基于 PHG 平台的六面体网格版本开发，采用了我们提出的一种高效谱元离散格式[43]，适合非结构网格，具备局部时间推进功能，并且支持 GPU、MIC 和国产申威众核处理器核等众核加速部件。

表 1 弹性波谱元并行程序在神威超级计算机上的测试结果

主核数	从核数	自由度	墙钟时间	并行效率
8	512	6 440 067	7.1779s	—
64	4 096	50 923 779	7.7185s	93.00%
512	32 768	405 017 091	7.8166s	91.83%
4 096	262 144	3 230 671 875	7.8879s	91.00%
32 768	2 097 152	25 807 570 947	7.9486s	90.30%
73 728	4 718 592	58 048 143 363	7.9363s	90.44%

PHG 平台下一步的研究重点是针对研制中的国产 E 级超级计算机，对平台进行性能优化和核心代码重构，进一步提升平台的并行可扩展性以及对国产异构众核加速部件的支持，同时，优化用户编程接口，力争在制约自适应有限元 E 级并行计算的“性能墙”和“编程墙”两方面取得突破，为面向 E 级计算机的自适应算法研究和 E 级自适应有限元并型应用程序的研制提供有效支撑。

3.2 复杂电磁系统的建模和计算

我国正处于工业化的快速进程中，对大型电力设备的需求量非常大，电力设备的数值仿真和优化设计在生产应用中的作用也越来越大。我国计算电磁学家在这方面做出了重要贡献，以程志光教授为代表的天威输变电技术研究院向国际计算电磁学会(International Compumag Society)提出了一个电气工程基准问题族，被称为 TEAM Workshop Problem 21 Family，现在仍是国际计算电磁学会的公开基准问题。大型变压器模拟是一个符合国家重大工程需求且有挑战性的科学问题，三维非线性 Maxwell 方程在大型变压器的铁损计算和优化设计中具有重要应用。变压器铁芯包含上千层硅钢片，其大尺度和绝缘漆小尺度之比超过，由于之前缺少实际可行的数值方法和软件模拟硅钢片内的三维涡流，需要对非线性 Maxwell 方程进行可计算建模。另外，变压器整结构模拟涉及到数亿未知数的大规模并行计算，因此需要针对问题的特点，设计非线性多尺度 Maxwell 方程的高效、可扩展的预处理方法。

针对大型变压器铁芯的多尺度结构，我们基于磁向量势方程，提出了一个简化的电磁涡流模型，它不需要计算硅钢片外敷的微米级绝缘层，从而将系统大小尺度之比减小了 3 个数量级，解决了变压器铁芯三维涡流分布的工程计算难题[54]。我们证明了简化涡流模型的适定性和近似解的收敛性，并对于非磁性材料证明了近似解和精确解的最优误差估计[55-56]。在此基础上，我们设计了有限元离散格式，并基于群体成员张林波研制的并行有限元软件平台 PHG，研制了变压器的并行自适应模拟程序 FEMAG (Fem for Electro Magnetics on Adaptive Grids)[57-58]，针对国际计算电磁学会基准问题 TEAM Workshop Problem 21c 得到了与实验数据

吻合的计算结果。我们还利用 FEMAG 在“天河 1A”并行计算机上开展了国际计算电磁学会的基准问题 TEAM Workshop Problem 21b 的数值模拟实验，最大 CPU 核数达 24576，最大未知数达 8.7 亿，弱并行可扩展性在 50%以上。

曹礼群等建立了线性 Maxwell 方程周期结构的均匀化理论[7-8]，法国著名数学家 J. C. Nedelec 研究了线性涡流问题的均匀化模型，但非线性 Maxwell 方程的理论和数值研究工作很少，多尺度非线性 Maxwell 方程的均匀化理论和数值研究还是空白。郑伟英等提出了非线性电磁涡流问题均匀化模型，证明了 Maxwell 方程的小尺度解在空间中强收敛于均匀化解，建立了电磁涡流问题有效参数方法的严格数学基础[59]。

4　总结和展望

过去几年，我们在最优化问题的子空间方法、大波数离散波动问题快速算法、压缩感知和低秩矩阵恢复、第一原理密度泛函理论的并行轨道更新算法等方面取得了富有创造性的研究成果；同时针对科学计算的若干前沿应用课题，研制和发展了适应于千万亿次高性能计算的并行自适应有限元软件平台 PHG，基于 PHG 计算平台群体成员及其它国内同行进行合作，在计算数学基础算法和应用研究方面取得了多项重要成果。

后续发展方向包括：正交约束优化问题的子空间方法，随机技术与共轭梯度、拟牛顿等相结合的新的优化计算方法；相位恢复的理论与算法；低维系统和半导体量子器件载流子输运和子能带光子跃迁问题的均匀化和多尺度方法；适应百亿亿次级计算的第一原理电子结构计算的方法与理论；复杂介质 Maxwell 方程的高阶有限元方法以及求解离散问题的波源转移区域分解算法；多尺度磁热流体耦合系统的可计算建模和高效数值方法；E 级超级计算机上的 PHG 平台及其在人工心脏流固耦合并行有限元模拟上应用等。

致谢　本研究得到国家自然科学基金创新研究群体项目（批准号：11021101）及延续（批准号：11321061）的资助。

参　考　文　献

[1] Yuan Y. Recent Advances in numerical methods for nonlinear equations and nonlinear least squares. Numerical Algebra, Control and Optimization, 2011, 1(1): 15—34.

[2] Niu L, Yuan Y. A parallel decomposition algorithm for training multiclass kernel-based vector machines. Optimization Methods and Software, 2011, 26 (3): 431—454.

[3] Grapiglia G, Yuan J, Yuan Y. A subspace version of the Powell-Yuan trust region algorithm for equality constrained optimization. Journal of the Operations Research Society of China, 2013, 1(4): 425—451.

[4] Dong Q, Liu X, Wen Z, et al. A parallel line search subspace correction method for composite convex optimization. Journal of the Operations Research Society of China, 3(2): 163—187.

[5] Yuan Y. A review on subspace methods for nonlinear optimization. Proceedings of International Congress of Mathematicians, 2014, Soeul, Korea, 807—827.

[6] Chen Z, Xiang X. A source transfer domain decomposition method for Helmholtz equations in unbounded domain. SIAM Journal of Numerical Analysis, 2013, 51 (4): 2331—2356.

[7] Chen Z, Xiang X. A source transfer domain decomposition method for Helmholtz equations in unbounded domainPart II: extensions. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications, 2013, 6 (3): 538—555.

[8] 陈志明，崔涛，向雪霜．波源转移区域分解算法：时谐弹性波方程．中国科学：信息科学，2016，46：1359—1371.

[9] Chen J, Chen Z, Huang G. Reverse time migration for extended obstacles: acoustic waves. Inverse Problems, 2013, 29 (8): 085005.

[10] Chen J, Chen Z, Huang G. Reverse time migration for extended obstacles: electromagnetic waves. Inverse Problems, 2013, 29 (8): 085006.

[11] 陈志明，黄光辉．扩展障碍物的逆时偏移算法：弹性波．中国科学：数学，2015，45：1103—1114.

[12] Chen Z, Huang G. Reverse time migration for reconstructing extended obstacles in planar acoustic waveguides. Science in China: Series A Mathematics, 2015, 58: 1811—1834.

[13] Chen Z, Huang G. Phaseless imaging by reverse time migration: acoustic waves. Numerical Mathematical: Theory, Methods and Applications, 2017, 10 (1): 1—21.

[14] Chen Z, Huang G. A direct imaging method for electromagnetic scattering data without phase information. SIAM Journal on Imaging Sciences, 2016, 9 (3): 1273—1297.

[15] Chen Z，Huang G. Reverse time migration for reconstructing extended obstacles in the half space. Inverse Problems，2015，31 (5)：055007.

[16] 许志强. 压缩感知. 中国科学：数学，2012，42 (9)：865—877.

[17] Xu G，Xu X. Compressed sensing matrices from Fourier matrices. IEEE Transactions on Information Theory，2015，61 (1)：469—478.

[18] Xu Z. Deterministic sampling of sparse trigonometric polynomials. Journal of Complexity，2011，27(2)：133—140.

[19] Xu Z，Zhou T. On sparse interpolation and the design of deterministic interpolation points. SIAM Journal on Scientific Computing，2014，36 (4)：1752—1769.

[20] Zhou T，Narayan A，Xu Z. Multivariate discrete least-squares approximations with a new type of collocation grid. SIAM Journal on Scientific Computing，2014，36 (5)：A2401—A2422.

[21] Wang Y，Xu Z. Phase retrieval for sparse signals. Applied and Computational Harmonic Analysis，2014，37 (3)：531—544.

[22] Voroninski V，Xu Z. A strong restricted isometry property，with an application tophaselesscompressedsensing. Applied Computational Harmonic Analysis，2016，40(2)：386—395.

[23] Gao B，Wang Y，Xu Z. Stable signal recovery from phaseless measurements. Journal Fourier Analysis Applications，2016，22(4)：787—808.

[24] Xu Z. The minimal measurement number for low-rank matrices recovery. Applied and Computational Harmonic Analysis，2017. https://doi.org/10.1016/j.acha.2017.01.005.

[25] Huang J，Cao L，Yang S. A molecular dynamics-continuum coupled model for heat transfer in composite materials. SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation，2012，10(4)：1292—1316.

[26] Zhang L，Cao L，Luo J. Multiscale analysis and computation for a stationary Schrödinger-Poisson system in heterogeneous nanostructures. SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation，2014，12(4)：1561—1591.

[27] Cao L，Li K，Luo J，Wong Y. A multiscale approach and a hybrid FE-FETD algorithm for 3D time-dependent Maxwell's equations in composite materials. SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation，2015，13(4)：1446—1477.

[28] Huang J，Cao L. Global regularity and multiscale approach for thermal radiation heat transfer. SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation，2014，12(2)：694—724.

[29] Wang X，Cao L，Wong Y. Multiscale computation and convergence for coupled thermoelastic system in composite materials. SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation，2015，13(2)：661—690.

[30] Cao L，Zhang L，Allegretto W，Lin Y. Multiscale asymptotic method for Steklov eigenvalue equations in composite media. SIAM Journal on Numerical Analysis，2013，51(1)：273—296.

[31] Liu J，Cao L，Yang N，CuiJ. Multiscale approach for optimal design in conductivity of composite materials. SIAM Journal on Numerical Analysis，2015，53(3)：1325—1349.

[32] Liu J，Cao L，Yan N. Multiscale asymptotic analysis and computation of optimal control for elliptic systems with constraints. SIAM Journal on Numerical Analysis，2013，51 (4)：1978—2004.

[33] Cao L，Liu J，Allegretto W，Lin Y. A multiscale approach for optimal control problems of linear parabolic equations. SIAM Journal on Control and Optimization，2012，50(6)：3269—3291.

[34] Zhou A. Hohenberg-Kohn theorem for Coulomb type systems and its generalization. Journal of Mathematical Chemistry，2012，50 (10)：2746—2754.

[35] Dai X，He L，Zhou A. Convergence and quasi-optimal complexity of adaptive finite element computations for multiple eigenvalues. IMAJournal on Numerical Analysis，2014，35 (4)：1934—1977.

[36] Chen H，Gong X，He L，et al. Numerical Analysis of Finite Dimensional Approximations of Kohn-Sham Models. Advances in Computational Mathematics，2013，38 (2)：225—256.

[37] Chen H，Dai X，Gong X，He L，Zhou A. Adaptive finite element approximations for Kohn-Sham models. Multiscale Modeling& Simulations，2014，12 (4)：1828—1869.

[38] Chen H，He L，Zhou A. Finite element approximations of nonlinear eigenvalue problems in quantum physics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，2011，200 (21)：1846—1865.

[39] 戴小英，周爱辉. 第一原理实空间并行自适应计算程序设计原理. 中国科学：信息科学，2016，46：800—811.

[40] 张林波，郑伟英，卢本卓，等. 并行自适应有限元软件平台 PHG 及其应用. 中国科学：信息科学，2016，46(10)：1442—1464.

[41] Liu H，Chen Z，Zhang L. Parallel construction of Hamiltonian paths for conforming tetrahedral meshes. International Journal of Computer Mathematics，2013，90 (7)：1366—1372.

[42] 刘辉，冷伟，崔涛. 高维 Hilbert 曲线编码与解码算法设计. 数值计算与计算机应用，2015，36(1)：42—58.

[43] 刘辉，崔涛，冷伟. HP 自适应有限元计算中的一种新的自适应策略，数值计算与计算机应用，2015，36(2)：100—112.

[44] Jiang X，Zhang L，Zheng W. Adaptive hp-finite element computations for timeharmonic Maxwell's equations. Communications in Computational Physics，2013，13 (2)：559—582.

［45］ 林灯，崔涛，冷伟，等．一种求解地震波方程的高效并行谱元格式．计算机研究与发展，2016，53(5)：1147—1155.

［46］ 朱恒亮，曾璇，崔涛，等．纳米集成电路互连线建模和光刻仿真中的大规模并行计算方法．中国科学：信息科学，2016，46(10)：1372—1391.

［47］ 成杰，张林波．一种可扩展的三维半导体器件并行数值模拟算法．计算物理，2012，29(3)：439—448.

［48］ TuB，ChenM，XieY，et al. A parallel finite element simulator for ion transport through three-dimensional ion channel systems. Journal of Computational Chemistry，2013，34(24)：2065—2078.

［49］ Xie Y，Cheng J，Lu B，et al. Parallel adaptive finite element algorithms for solving the coupled electro-diffusion equations. Molecular Based Mathematical Biology，2013，1：90—108.

［50］ Tu B，Bai S，Chen M，et al. A software platform for continuum modeling of ion channels based on unstructured mesh. Computational Science & Discovery，2014，7 (1)：014002.

［51］ Tu B，Xie Y，Zhang L，et al. Stabilized finite element methods to simulate the conductancesofion channels. Computer Physics Communications，2015，188：131—139.

［52］ Xie Y，Liu T，Tu B，et al. Automated parallel and body-fitted mesh generation in finite element simulation of macromolecular systems. Communications in Computational Physics，2016，19(3)：582—602.

［53］ Xu J，Xie Y，Lu B，et al. Charged substrate and product together contribute like a nonreactive species to the overall electrostatic steering in diffusion-reaction processes. Journal of Physical Chemistry B，2016，120(33)：8147—8153.

［54］ Zheng W，Cheng Z. An inner-constrained separation technique for 3D finite element modeling of GO silicon steel laminations. IEEE Transactions on Magnetics，2012，48(8)：2277—2283.

［55］ Jiang X，Zheng W. An efficient eddy current model for nonlinear Maxwell equations with laminated conductors. SIAM Journal on Applied Mathematics，2012，72：1021—1040.

［56］ Li P，Zheng W. An H-ψ formulation for the three-dimensional eddy current problem in laminated structures. Journal of Differential Equations，2013，254 (8)：3476—3500.

［57］ Zheng W，Chen X. Subspace correction method for computing magnetic shields in large power transformers. IEEE Transactions on Magnetics，2015，51(5)：1—6.

［58］ Cui T，Jiang X，Zheng W. FEMAG：ahighperformance parallel finite element toolbox for electromagnetic computations. International Journal of Energy and Power Engineering，2016，5：57—64.

［59］ Jiang X， Zheng W. Homogenization of quasi-static Maxwell's equations. Multiscal Modeling and Simulation：A SIAM Interdisciplinary Journal，2014，12 (1)：152—180.

Methods and applications of scientific and engineering computing

Cao Liqun　Chen Zhiming　Xu Zhiqiang　Yuan Yaxiang
Zhang Linbo　Zheng Weiying　Zhou Aihui

(*Academy of Mathematics and Systems Science*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100190)

Abstract　The paper reports the research progresses in fundamental computational methods and theory, multiscale computation in materials science, adaptive computation in complex electromagnetic systems, and parallel adaptive finite element software platform and its applications.

Key words　subspace method；sparse approximation；multiscale modeling；adaptive method；parallel computing