中国科学院软件研究所学术年会'2024
暨重点实验室科技活动周

学术论文

Commutation of Geometry-Grids and Fast Discrete PDE Eigen-Solver GPA
GPA: 快速离散 PDE 特征值解法器

孙家昶，曹建文，张娅，赵海涛

Chin. Ann. Math. Ser. B 44(5), 2023, 735-752

中国科学院软件研究所新培育方向，“E级并行算法与软件基础研究”：ISCAS-PYFX-202302

联系方式:(jiachang, jianwen, zhangya, haitao@iscas.ac.cn)

1. 研究背景及 GPA 算法

随着我国 E-级高性能计算系统与应用的发展，求解超大规模数学物理离散方程性能效率低下的瓶颈已日益突出. 结合我们在并行预条件子及区域分解等高效求解器的研究经验，对 Jordan 标准型所依据的代数基本定理进行了再思考，提出通过几何网格(G)作预变换，将大型 PDE(P) 特征值矩阵(A)化为若干块对角子问题的异步并行算法(简称 GPA 算法). 通过分析块矩阵所代表的子空间之间的耦合关系，根据问题需要，把高阶离散矩阵之间的特征值问题通过因式分解解耦到各相关的子块，先分解为一批低阶矩阵特征值问题，后再异步并行调用相应的函数，整体实现特征值问题的高效内在并行计算，并通过引入符号计算来实现计算复杂度的数量级降阶.

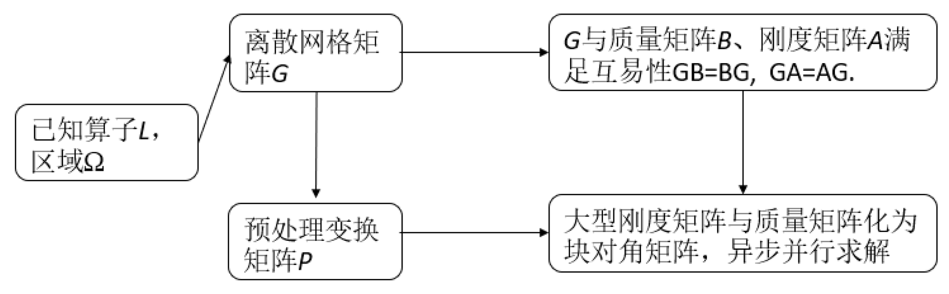
2. 主要结果及数值算例

假定满足高次方程 $G^m = I$ 的几何网格矩阵 G 与 PDE 离散后的刚度矩阵 A 和质量矩阵 B 之间乘法存在互易性:

$$AG = GA, \quad BG = GB.$$

利用几何不变性可把 A 正交分解为 m-块对角块矩阵($m \ll N = \dim(A)$). 针对非规则的二维单元 (三角形、方形、方环L-型、六边形…)和典型三维剖分单元(如六面体、四面体、十二面体单元等), 提出了计算 PDE 离散特征值问题高效的异步并行预处理降阶算法, 给出了相关理论的证明及数值计算实例, 证明了“几何网格预变换的并行度与多面体的面数成正比”的结论.

GPA (Geometric intrinsic pre-processing algorithm) 基本研究框架:



G 矩阵为置换矩阵(每行仅有一个元素为 1 或者 -1，其余为 0 元素).

P 矩阵为稀疏正交矩阵，每行每列仅有有限个元素，为 1 在单位圆上的根.

- 立方体网格 GPA 数值算例（稀疏情形，误差 e-13）

n	N	t_1	t_2	SP
17	4096	5.1932	0.1440	36.06
21	8000	35.593	0.6606	53.88
25	13824	179.396	3.4417	52.12
31	27000	1272.08	24.1747	52.62

- n: 每个方向网格数; N: 自由度; t_1: 预处理前计算时间; t_2: 预处理后计算时间; SP: 加速比.

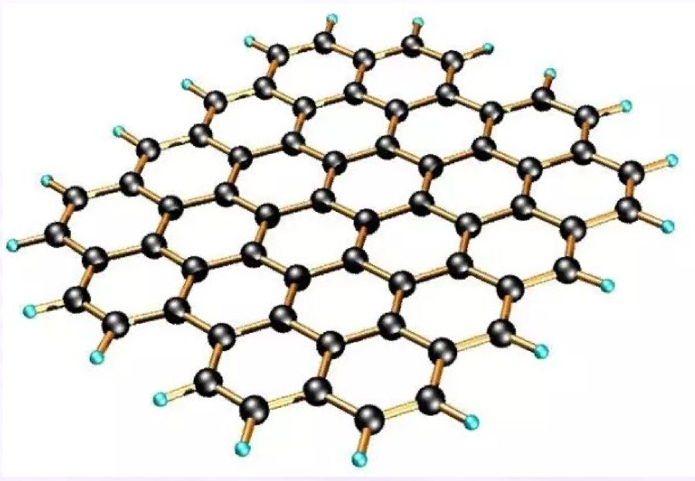
- 立方体网格预变换矩阵任意阶程序

Algorithm 1 预变换矩阵 P, J, F_1

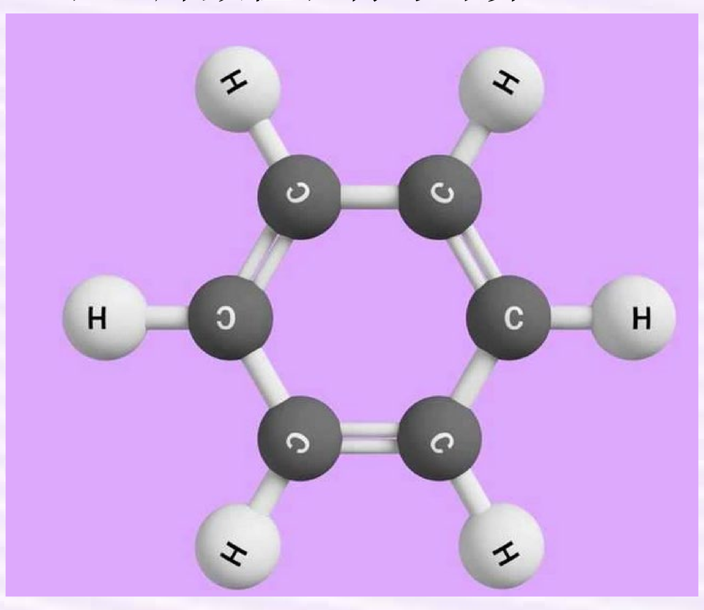
```
令d = fix(n/2), L = 0
for k = 1 : d do
    for i = 1 : n − (2 ∗ k − 1) do
        for j = 1 : n − (2 ∗ k − 1) do
            L = L + 1;
            id(L,1) = (i − 1) ∗ n + j + (n^2 + n + 1) ∗ (k − 1)
            id(L,2) = (i − 1) ∗ n^2 + j ∗ n + (n^2 + n − 1) ∗ (k − 1)
            id(L,3) = j ∗ n^2 − (i − 1) + (n^2 − n − 1) ∗ (k − 1)
            id(L,4) = DOF + 1 − id(L,1)
            id(L,5) = DOF + 1 − id(L,2)
            id(L,6) = DOF + 1 − id(L,3)
            P(L,id(L,1)) = 1
            P(L,id(L,2)) = 1
            P(L,id(L,3)) = 1
            P(L,id(L,4)) = 1
            P(L,id(L,5)) = 1
            P(L,id(L,6)) = 1
            .
            .
        end for
    end for
end for
for i = 1 : d do
    L = L + 1;
    id(L,1) = (n^2 − n + 1) ∗ i
    id(L,2) = n^3 − n^2 + n − (n^2 − n + 1) ∗ (i − 1)
    P(L,id(L,1)) = 1
    P(L,id(L,2)) = 1
    J(L,id(L,1)) = −1
    J(L,id(L,2)) = 1
end for
if mod(n,2) == 1 then
    P(N_P,(DOF + 1)/2) = 1

end if
```

3. 应用：电子结构计算



石墨烯数值和符号计算



苯环数值和符号计算

4. 主要相关文献

孙家昶, 数学物理方程离散特征值问题的几何网格因式分解算法, 计算数学, 44(4), 433-465, 2022.

孙家昶, GPA: 基于多面体网格几何并行性的矩阵特征多项式异步因式分解器, 中国科学:数学, 53(6), 1-36, 2023.

孙家昶, 几何网格基因算法与CAD, 第十四届全国几何设计与计算大会特邀报告, 2022,08,20, 青岛.

孙家昶, 科学工程计算的几何网格预变换子, 北京市基金委“数学筑基、软件突围”交叉科学论坛特邀报告, 2022.12.15, 北京.

孙家昶, Intrinsic Parallel Algorithm GPA for Discrete PDE Eigen-problems, The Second Workshop on Exascale High Performance Computing Software and Algorithm, 2023.08, 北京.

孙家昶, GPA for numerical PDE eigen-problems, 中国科学院深圳先进技术研究院重点实验室学术年会, 2023,12, 深圳.

钱德沛, 孙家昶, 祝明发, 张林波, 中国高性能计算30年, 北京: 科学出版社, 2024.06.