# 河南省科学技术奖公示内容

**项目名称：**高性能稀疏矩阵算法分析及应用

**提名者：**张理涛

**提名意见：**

该成果主要针对石油勘探、气候模拟、天体物理、人工智能、大数据处理等实际问题数值模拟离散后的大型稀疏矩阵系统，研究高性能数值算法和预处理技术，并将所得成果应用于实际问题的数值模拟，提高模拟的整体效率。该成果结合物理模型和数学模型，研究出针对性强、适用性好、理论价值高的高性能迭代算法，形成了较为系统的理论。其研究结果不仅能丰富大型稀疏矩阵系统的求解理论和方法，而且为求解具体的实际问题提供一定的理论依据和算法支持，具有较好的应用前景和很好的推广价值，国际上属于数值代数的热点问题。

该研究成果由2项国家自然科学基金、1项河南省科技创新杰出青年基金、1项航空科学基金、1项河南省高校科技创新人才支持计划、1项河南省高等学校重点科研项目计划、25篇高水平SCI(EI)期刊论文（2篇2区,7篇3区,9篇4区,4篇EI）、3篇中文核心期刊论文和9项发明专利（6项中国发明专利，3项实用新型专利）支撑，成果丰硕，达到了国内领先水平，同意推荐。

**项目简介：**

利用大量处理单元的聚合计算能力来解决复杂问题，是高性能计算（high performance computing，HPC）最直观的定义。高性能计算已成为继理论科学和实验科学之后科学探索的第三范式，被广泛应用在高能物理研究、核武器设计、航天航空飞行器设计、国民经济的预测和决策、能源勘探、中长期天气预报、卫星图像处理、情报分析、互联网服务、工业仿真等领域，对国民经济发展和国防建设具有重要的价值。它作为世界高技术领域的战略制高点，已经成为科技进步的重要标志之一，同时也是一个国家科技综合实力的集中体现。

本成果在国家自然科学基金“特殊鞍点问题的高效预处理技术及在电磁计算中的应用研究(11501525)”和“适合分布式并行计算改进的GCRS算法研究”及河南省高校科技创新人才支持计划“线性互补问题的广义模系同步整体多分裂算法研究(16HASTIT040)”等项目的支持下，采用“算法分析-数值试验-方法创新-成果应用”等反复循环研究手段，主要针对石油勘探、气候模拟、天体物理、人工智能、大数据处理等实际问题数值模拟离散后的大型稀疏矩阵系统，研究高性能数值算法和预处理技术，并将所得成果应用于实际问题的数值模拟，提高模拟的整体效率。该成果具有以下五个方面重要科学发现：

1.针对大型稀疏矩阵方程组，通过降低整体同步化点和算法重构，设计了适合分布式并行计算改进的广义平方共轭残差算法2(IGCRS2)、并行广义全局平方共轭梯度算法(PGGl-CGS)和并行双共轭A-正交正规化算法(PBiCOR)，新算法使所有内积计算及矩阵向量乘是独立的，并分析了算法的收敛性、复杂度、并行性和等效率等，解决了迭代方法并行计算的瓶颈问题。

2.针对工程和科学计算中实际问题数值模拟离散得到的一类特殊2乘2块线性矩阵方程组，设计了广义非精确块三角预处理子、参数化移位分裂预处理子（PSS）、改进的移位分裂迭代算法(MSS)和改进的广义参数不精确uzawa迭代算法(IGPIU)，基于对稀疏矩阵构造实用的矩阵分裂，获得适用于实际问题的快速有效预处理迭代算法，并对设计的预处理矩阵特征值分布、相应的特征向量、最小多项式和最优参数的选取进行理论分析，并结合Krylov子空间方法,应用电磁计算中Oseen方程、Maxwell方程和Stokes方程做数值试验，进一步验证和比较其性能。

3.针对大型稀疏线性矩阵互补问题，采用矩阵分裂技巧、松弛外推迭代技术和加速思想，设计了广义模系同步(块)多分裂多参数迭代算法、广义模系同步整体(块)多分裂多参数迭代算法和带阻尼因子的重叠限制加法Schwarz算法，并在松弛参数和多分裂合理限制下，分析这些迭代法的收敛性，从而改善多分裂算法参数收敛的固有模式。

4.针对特殊稀疏矩阵方程组，设计了全局松弛矩阵并行多分裂USAOR（GUSAOR）迭代法、松弛型矩阵多分裂混合迭代法和广义的MSSOR迭代法，理论分析得到更弱的收敛区间，改善了多分裂算法参数收敛的固有模式，并把此结果推广到解非线性问题中；设计了牛顿-整体松弛非定常矩阵多分裂多参数USAOR迭代法（简记为NGRNMM-USAOR迭代法），建立了局部收敛性定理，估计了收敛速度。

5.针对中子输运理论中得到的非对称代数黎卡提矩阵方程，构建了求解向量方程的修正Newton-Shamanskii算法和松弛Newton-like算法，理论分析和数值实验均表明，在迭代次数、迭代时间和误差比较方面，有较好的有效性和鲁棒性；为了降低全局广义最小残差方法（global generalized minimal error，GLGMERR）的计算代价和存储要求，设计了不完全全局广义最小残差方法，数值实验表明，与传统的全局GMERR方法相比，在CPU计算时间和存储要求方面都有较好的有效性和鲁棒性。

将本课题的成果应用于石油勘探开发数据模型、数值天气预报模型及航空航天飞行设备新型半导体器件模型的科学试验和数值模拟，提高了油气产量和油气采收率，改善了数值天气预报的计算效率，节省了开发新器件所需的成本，提高了生产效益，累计节省开支壹亿伍仟万元，并为解决科学计算和工程技术中的特殊线性问题提供新的途径，为求解更一般的线性方程组提供新思路。

**客观评价：**

1. **教育部科技查新工作站评价(见附件材料)：**

本查新项目研发的“高性能稀疏矩阵算法分析及应用”具有的特点，综合分析检索到的国内相关文献，并与委托项目的查新点进行对比分析，得出以下结论：

**（一）该项目组的前期研究成果；**

检索到文献中有该项目组的前期研成果，探讨了线性方程组和特殊鞍点问题的并行迭代算法与预处理技术研究【见密切相关文献1-4】。

**(二)关于“参数化移位分裂预处理子（PSS）、适合分布式并行计算改进的广义平方共轭残差算法(IGCRS)、改进的广义平方共轭残差算法2(IGCRS2)、并行广义全局平方共轭梯度算法(PGGl-CGS)、并行双共轭A-正交正规化算法(PBiCOR)及块三角预处理子”的相关研究；**

检索到文献报道了改进的SNS和SSS迭代法【见相关文献5】；探讨了广义的改进斜正规分裂(GMSNS)迭代法【见相关文献6】；研究了单步HSS迭代法【见相关文献7】；分析了一种新的PMHSS迭代法【见相关文献8】；报道了一种新分裂迭代方法【见相关文献9】；探讨了一种SCRS并行算法【见相关文献10】；研究了改进的并行广义共轭残差算法【见相关文献11】；分析了一种并行广义乘积型双共轭残差方法【见相关文献12】。上述文献5-12均未涉及该项目所述的参数化移位分裂预处理子（PSS）、适合分布式并行计算改进的广义平方共轭残差算法(IGCRS)、改进的广义平方共轭残差算法2(IGCRS2)、并行广义全局平方共轭梯度算法(PGGl-CGS)、并行双共轭A-正交正规化算法(PBiCOR)及块三角预处理子方面的研究。

**（三）关于“全局松弛矩阵并行多分裂USAOR（GUSAOR）迭代法、改进的移位分裂迭代法(MSS)、改进的广义参数不精确uzawa迭代法(IGPIU)及求解向量方程的松弛Newton-like方法、修正的非线性Uzawa迭代法”的相关研究；**

检索到文献研究了一种Newton-Triangle Splitting迭代法【见相关文献13】；探讨了一种新交替线性隐式迭代法【见相关文献14】；分析了一种Newton-Triangle Splitting迭代法【见相关文献15】；报道了一种Newton-PSS迭代法【见相关文献16】；研究了一种新的改进SSOR方法【见相关文献17】；探讨了一类广义SSOR预条件子【见相关文献18】；分析了SOR方法的另一种形式及其推广【见相关文献19】；研究了一种修正SSOR方法【见相关文献20】；探讨了一种最新的Hermitian/Skew-Hermitian splitting(HSS)迭代理论【见相关文献21】。上述文献13-21均未涉及该项目所述的全局松弛矩阵并行多分裂USAOR（GUSAOR）迭代法、改进的移位分裂迭代法(MSS)、改进的广义参数不精确uzawa迭代法(IGPIU)及求解向量方程的松弛Newton-like方法、修正的非线性Uzawa迭代法方面的研究。

**（四）关于“牛顿-整体松弛非定常矩阵多分裂多参数USAOR迭代法、松弛型模系同步(块)多分裂多参数迭代法、带阻尼因子的重叠限制加法Schwarz算法”的相关研究；**

检索到文献报道了一种块迭代方法【见相关文献22】；研究了预条件广义块AOR，SSOR方法【见相关文献23】；探讨了一种并行矩阵多分裂多参数松弛算法【见相关文献24】；分析了异步并行矩阵多分裂多参数松弛算法【见相关文献25】；探讨了一种USAOR迭代法【见相关文献26】；研究了一种Newton-Krylov-Schwarz算法【见相关文献27】；探讨了一种并行Schwarz算法【见相关文献28】；分析了乘性Schwarz算法【见相关文献29】。上述文献22-29均未涉及该项目所述的牛顿-整体松弛非定常矩阵多分裂多参数USAOR迭代法、松弛型模系同步(块)多分裂多参数迭代法、带阻尼因子的重叠限制加法Schwarz算法方面的研究。

**该查新项目的主要技术特点在于：**

1. 针对大型稀疏增广线性方程组，设计了参数化移位分裂预处理子（PSS）、适合分布式并行计算改进的广义平方共轭残差算法(IGCRS)、改进的广义平方共轭残差算法2(IGCRS2)、并行广义全局平方共轭梯度算法(PGGl-CGS)、并行双共轭A-正交正规化算法(PBiCOR)及块三角预处理子。

2. 针对大型稀疏线性方程组，设计了全局松弛矩阵并行多分裂USAOR（GUSAOR）迭代法、改进的移位分裂迭代法(MSS)、改进的广义参数不精确uzawa迭代法(IGPIU)及求解向量方程的松弛Newton-like方法、修正的非线性Uzawa迭代法。

3. 针对非线性方程组，设计了牛顿-整体松弛非定常矩阵多分裂多参数USAOR迭代法（简记为NGRNMM-USAOR迭代法）。针对大型稀疏线性互补问题，设计了松弛型模系同步(块)多分裂多参数迭代法及带阻尼因子的重叠限制加法Schwarz算法。

**经检索并对相关文献分析对比结果表明：**在所列检索范围内检索到的国内公开发表的中文文献中，除该项目组的前期研究成果【见密切相关文献1-4】外，未见与该查新项目以上技术特点相符的文献报道。

**二、国家自然科学基金、特殊鞍点问题的高效预处理技术及在电磁计算中的应用研究、11501525、18万，结题评价如下(见附件)：**

你承担的国家自然科学基金项目：(特殊鞍点问题的高效预处理技术及在电磁计算中的应用研究)，批准号：(11501525)按有关规定已审核完毕，准予结题。

工程和科学计算中的很多重要领域都涉及到大型稀疏线性问题的求解。本课题针对产生的特殊鞍点问题，设计了免增广的结构化预处理子，对设计的预处理矩阵特征值分布、相应的特征向量、最小多项式和最优参数的选取进行理论分析，并结合Krylov子空间方法，应用电磁计算中Oseen方程、Maxwell方程和Stokes方程做数值试验，进一步验证和比较其性能。采用辅助参数与增广技术，更好的调节预处理矩阵特征值的分布，进而获得相对应的实用、可行、高效的预处理迭代算法；针对产生的奇异鞍点问题，设计了一种改进的广义参数化不精确Uzawa算法(IGPIU)，并对设计的算法进行了半收敛性分析，并应用电磁计算中不可压缩稳态斯托克斯方程，在不同的网格下做数值试验求解奇异鞍点问题，并记录迭代步数、运行时间、残差下降曲线和特征值分布，验证了所提算法的性能；设计了模系同步多分裂多参数迭代法、模系同步整体多分裂多参数迭代法,并在松弛参数和多分裂合理限制下,对这些迭代法进行收敛性分析,取得了更弱的收敛性区间，改善了多分裂算法参数收敛的固有模式；针对大型稀疏线性方程组，通过降低整体同步化点和算法重构，设计了适合分布式并行计算的并行双共轭正交残差算法(PBiCOR)，使所有内积计算及矩阵向量乘是独立的，无数据相关性，可进行计算与通讯的重叠，并分析了算法的收敛性、复杂度、并行性和等效率等，解决了迭代方法并行计算的瓶颈问题。本项目所提问题的解决，势必为航空航天、流体力学、计算电磁学、Maxwell方程、油藏模拟、椭圆型偏微分方程的混合有限元离散等计算科学与工程学领域提供一种高校的数值求解计算方法，同时为高效地求解大型稀疏线性问题提供必需的理论依据和应用价值。

**三、国家自然科学基金，适合分布式并行计算改进的GCRS算法研究，11226337，3万，结题评价如下(见附件)：**
 你承担的国家自然科学基金项目：(适合分布式并行计算改进的GCRS算法研究)，批准号：(11226337)按有关规定已审核完毕，准予结题。

本研究项目提出了一种适合于分布式并行环境，求解大型稀疏非对称线性方程组改进的广义平方共轭残差(Generalized Conjugate Residual Squared)算法，简记为IGCRS(Improved Generalized Conjugate Residual Squared)算法。通过算法重构，IGCRS方法比GCRS方法所需要的两个全局同步化点降低到了一个，并且所有内积计算以及矩阵向量乘积是独立的，没有数据相关性，可进行计算与通信的重叠。本研究项目提出的方法组合了数值稳定性与并行算法设计的要素，代价仅是增加了一点计算量。性能分析表明IGCRS方法比GCRS 方法具有更好的并行性和可扩展性。数值试验表明IGCRS方法相比于GCRS方法，利用不同的处理器台数并行通讯性能改进平均趋向于52.19%,同时还比较了BiCR, GCRS2,BiCG和CGS的收敛速度。本研究项目提出的IGCRS迭代算法组合数值稳定性和并行算法设计的要素，对实际数值模拟问题的求解提供了一定的理论依据和应用价值。

**四、河南省科技创新杰出青年基金、高性能并行计算在CFD数值模拟中的应用研究、184100510004、30万，结题评价如下(见附件材料)：**

该项目针对航空CFD数值模拟中线性方程组收敛性问题，设计了高效预处理算法和高效预处理子，研制了适合于异构多核并行机的并行Krylov子空间迭代方法、牛顿-松弛非定常多分裂多参数迭代法、广义模系同步整体(块)多分裂迭代法。经数值模拟计算验证，在实际应用中能够达到较高的并行计算效率。

**五、河南省高校科技创新人才支持计划、线性互补问题的广义模系同步整体多分裂算法研究、16HASTIT040、40万，结题评价如下(见附件)：**

该项目提交的研究资料完整，结项报告系统详实，经审查符合结项要求，准予结项。

**主要完成人员情况:**

张理涛、排名第1、教授、郑州航空工业管理学院、对本成果《主要科技创新》栏中所列第1、2、3、4、5项创新均做出了创造性贡献：针对大型稀疏矩阵方程组，设计了适合分布式并行计算改进的广义平方共轭残差算法、并行广义全局平方共轭梯度算法、并行双共轭A-正交正规化算法、广义非精确块三角预处理子、参数化移位分裂预处理子、改进的移位分裂迭代算法、改进的广义参数不精确uzawa迭代算法、模系同步整体(块)多分裂多参数迭代算法、带阻尼因子的重叠限制加法Schwarz算法、全局松弛矩阵并行多分裂USAOR迭代法和松弛型矩阵多分裂混合迭代法。完成人在本项目技术研发工作中投入的工作量占本人工作总量的100%.

 李建磊、排名第2、副教授、华北水利水电大学、对本成果《主要科技创新》栏中所列第2、4、5项创新均做出了创造性贡献：针对大型稀疏矩阵方程组，设计了广义非精确块三角预处理子、参数化移位分裂预处理子、改进的移位分裂迭代算法、改进的广义参数不精确uzawa迭代算法、全局松弛矩阵并行多分裂USAOR迭代法、松弛型矩阵多分裂混合迭代法、修正Newton-Shamanskii算法、松弛Newton-like算法和不完全全局广义最小残差方法。完成人在本项目技术研发工作中投入的工作量占本人工作总量的60%.

赵莹超、排名第3、讲师、郑州航空工业管理学院、对本成果《主要科技创新》栏中所列第4项创新均做出了创造性贡献：针对大型稀疏矩阵方程组，设计了模系同步(块)多分裂多参数迭代算法和模系同步整体(块)多分裂多参数迭代算法。完成人在本项目技术研发工作中投入的工作量占本人工作总量的30%.

冯二宝、排名第4、讲师、郑州航空工业管理学院、对本成果《主要科技创新》栏中所列第2、3项创新均做出了创造性贡献：针对大型稀疏矩阵方程组，设计了广义非精确块三角预处理子、参数化移位分裂预处理子和改进的移位分裂迭代算法。完成人在本项目技术研发工作中投入的工作量占本人工作总量的30%.

 张一帆、排名第5、学生、郑州航空工业管理学院、对本成果《主要科技创新》栏中所列第4项创新均做出了创造性贡献：针对大型稀疏矩阵方程组，设计了模系同步(块)多分裂多参数迭代算法和模系同步整体(块)多分裂多参数迭代算法。完成人在本项目技术研发工作中投入的工作量占本人工作总量的30%.

**完成人合作关系说明:**

项目主要完成人张理涛为郑州航空工业管理学院数学学院教师，是校级科研创新团队带头人，是若干SCI期刊论文、发明专利和科研项目主要完成人；主要完成人李建磊为华北水利水电大学数学与统计学院教师，是若干SCI期刊论文主要完成者；主要完成人赵莹超为郑州航空工业管理学院教师，是1篇中科院JCR3区SCI期刊论文、3项发明专利主要完成者；主要完成人冯二宝为郑州航空工业管理学院教师，是4项发明专利主要完成者；主要完成人张一帆为郑州航空工业管理学院学生，是1篇中科院JCR3区SCI期刊论文主要完成者。负责人和完成人之间有着长期的合作关系。

完成人张理涛是本项目的负责人，2013年1月到2019年12月，和李建磊、赵莹超、冯二宝共同完成的科技成果获奖，排名第一(见附件)；2020年1月到2020年12月，和张理涛合著1篇SCI期刊论文，排名第三（见附件）；2014年1月到2014年12月，和李建磊合著1篇SCI期刊论文，排名第一(见附件)；2016年1月到2016年12月，和李建磊合著1篇SCI期刊论文，排名第二(见附件)；2013年1月到2013年12月，和李建磊合著1篇SCI期刊论文，排名第四(见附件)；2019年1月到2020年5月和赵莹超、张一帆合著1篇SCI期刊论文，排名第一（见附件）；2018年1月到2020年12月，和赵莹超共同完成授权3项中国发明专利，排名第一（见附件）；2018年1月到2019年12月，和冯二宝共同完成授权1项中国发明专利，排名第一（见附件）；2016年1月到2017年12月，和冯二宝共同完成授权1项中国发明专利，排名第一（见附件）；2020年1月到2020年12月，和冯二宝共同完成授权1项实用新型专利，排名第二（见附件）；2020年1月到2020年12月，和冯二宝共同完成授权1项实用新型专利，排名第三（见附件）。

完成人李建磊是本项目的主要完成人，2013年1月到2019年12月，和张理涛、赵莹超、冯二宝共同完成的科技成果获奖，排名第二(见附件)；2014年1月到2014年12月，和李建磊合著1篇SCI期刊论文，排名第二(见附件)；2016年1月到2016年12月，和张理涛合著1篇SCI期刊论文，排名第一(见附件)；2013年1月到2013年12月，和张理涛合著1篇SCI期刊论文，排名第一(见附件)。

完成人赵莹超是本项目的主要完成人，2013年1月到2019年12月，和张理涛、李建磊、冯二宝共同完成的科技成果获奖，排名第三(见附件)；2019年1月到2020年5月和张理涛、张一帆合著1篇SCI期刊论文，排名第四（见附件）；2018年1月到2020年12月，和张理涛共同完成授权3项中国发明专利，排名第三（见附件）。

完成人张一帆是本项目的主要完成人，2019年1月到2020年5月，和张理涛、赵莹超合著1篇SCI期刊论文，排名第五（见附件）；2020年1月到2020年12月，和张理涛合著1篇SCI期刊论文，排名第三（见附件）。

**主要完成单位情况:**

郑州航空工业管理学院、排名第1、郑州航空工业管理学院现有的计算机、工作站等设备极大地满足了本成果所涉及的算法设计、编程及上机运行的需要。对于基于异构多核体系结构并行计算机所要进行的数值试验和实际问题的模拟，学校大力支持课题组与北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室的合作，并可以远程访问方便有效地利用北京九所拥有的异构多核千万亿次并行机和多台分布式高性能计算机：另一方面，学校图书馆拥有较全的中文和英文期刊全文数据库，为各种研究资料的查询提供了极大的便利条件。学院领导非常重视该研究课题的申请，并在科研人员的工作时间和设备的使用方面给予充分的保证和支持。 学校出面积极寻找应用单位，使该课题的成果应用于石油勘探开发数据模型、数值天气预报模型及航空航天飞行设备新型半导体器件模型的科学试验和数值模拟，提高了油气产量和油气采收率，改善了数值天气预报的计算效率，节省了开发新器件所需的成本。

华北水利水电大学、排名第2、华北水利水电大学提供了良好的科研平台，为成果主持人张理涛和李建磊进行学术交流提供大力支持。2013年到2016年间，李建磊针对大型稀疏矩阵方程组，设计了广义非精确块三角预处理子、参数化移位分裂预处理子、改进的移位分裂迭代算法、改进的广义参数不精确uzawa迭代算法、全局松弛矩阵并行多分裂USAOR迭代法、松弛型矩阵多分裂混合迭代法、修正Newton-Shamanskii算法、松弛Newton-like算法和不完全全局广义最小残差方法。华北水利水电大学积极协助寻找应用单位，尤其对提出的高性能算法和预处理技术在石油勘探数值模拟、天气预报数值模拟和半导体器件数值模拟中推广应用。