解法器问题集（2018-2020）

Solver 研讨会组委会[1]

一、引言

从第一届解法器会议（Solver18）开始，我们每年公开征集解法器相关的各类问题，并在会议上设置专门环节对每个问题进行介绍。这些问题经审阅并由提出人确认后，收集在这个问题集中。**目前，我们收集了三届会议共 22 个问题。**

编辑这个问题集的目的，一方面，是希望这些问题能够引起解法器同行的兴趣和关注，另一方面，也希望通过这种方式促进解法器领域的交流与合作。对任何问题有疑问或需要讨论，可以联系相关问题的提出人。

这个问题集每年都会更新，在每年的 Solver 研讨会上也会设置专题讨论这些问题的进展。任何人对相关问题有兴趣，欢迎参加研讨会，也欢迎同行提出更多的问题。如果对相关问题有任何进展，也欢迎联系我们。

最后，感谢所有问题的贡献人。

二、历届 Solver 研讨会

会议网址：**http://www.multigrid.org/solver/conference/index.html**

1. Solver2020（苏州，2020.8.6-8）
2. Solver2019（昆明，2019.8.15-17）
3. Solver2018（韶山，2018.6.22-25）

[1]联系：舒适（shushi@xtu.edu.cn），徐小文（xwxu@iapcm.ac.cn），张晨松（zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

三、问题贡献人（含共同提出的问题）

1. 安恒斌：1 个问题（S20-1）
2. 陈荣亮：1 个问题（S19-2）
3. 冯春生：1 个问题（S19-1）
4. 顾先明：1 个问题（S20-2）
5. 刘伟峰：2 个问题（S18-8，S20-3）
6. 舒　适：1 个问题（S18-1）
7. Solver-PC：1 个问题（S20-8）
8. 谭光明：1 个问题（S20-6）
9. 谢和虎：2 个问题（S18-2, S18-3）
10. 徐小文：7 个问题（S18-4, S18-5, S18-7, S19-3, S19-4, S19-5, S19-6）
11. 薛　巍：2 个问题（S20-4, S20-5）
12. 岳孝强：1 个问题（S20-2）
13. 张晨松：5 个问题（S18-6, S18-7, S19-1, S19-6，S20-7）

四、问题集（编号 Sxy-n 表示 xy 年的第 n 个问题）

● 2018（1-8）

(S18-1)[2] 解法器交流平台建设。

舒适（湘潭大学, shushi@xtu.edu.cn）

(S18-2) 极小化内积计算的矩阵特征值并行算法。

谢和虎（中科院数学与系统科学研究院，hhxie@lsec.cc.ac.cn）

(S18-3)[3] 避免高维正交化的矩阵特征值并行算法。

谢和虎（中科院数学与系统科学研究院，hhxie@lsec.cc.ac.cn）

(S18-4) 为什么经典 AMG 粗化算法（Ruge&Stueben, 1987）的算子复杂度在二维和三维情形有明显差异？例如，对 Poisson 方程的二维九点格式，RS 粗化的算子复杂度几乎可以保持在 2.0 左右，与网格规模无关，而对于三维七点格式，网格规模从数千增加到千万量级时，算子复杂度从 3 增加到 30。

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S18-5) 对于 M-矩阵，如何保证 AMG 粗网格矩阵的 M 性质？（相关问题：**S19-3**）

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S18-6) 适应多物理耦合、非对称等实际应用特征的 AMG 算法。

张晨松（中科院数学与系统科学研究院, zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

(S18-7)[4,5] 现有 AMG 算法的收敛性、健壮性、以及实现效率与并行可扩展性。

---

[2]**相关进展**：冯春生、张晨松、徐小文等组织了解法器专门网页。

[3]**相关进展**：Yu Li, HehuXie, Ran Xu 等提出一个求解特征值问题的广义 CG 方法，可以减少正交化的开销，参考：Yu Li, et al (2020), A parallel generalized conjugate gradient method for large scale eigenvalue problems, CCF Trans. HPC, 2: 111-122.

[4]**相关进展**：相关问题的研究现状，可参考最近徐小文写的综述文章：徐小文(2019)，并行代数多重网格算法：大规模计算应用现状与挑战，数值计算与计算机应用，青年评述，40(4): 243-260.

5**相关进展**：徐小文等提出一个基于自适应 Setup 的 AMG 算法，可以在一定程度上改善 AMG 求解方程组序列的并行可扩展性，参考：X.Xu, et al (2020),aSetup-AMG: an adaptive‐setup‐based parallel AMG solver for sequence of sparse linear systems, CCF Trans.HPC, 2: 98-110.

张晨松（中科院数学与系统科学研究院, zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S18-8) 对于特定的稀疏结构，稀疏三角方程的求解是否已经达到了性能上界？

刘伟峰（挪威科技大学[6]，weifeng.liu@cup.edu.cn）

● 2019（1-6）

(S19-1) 如何确保解法器库在不同软硬件环境中的可移植性。有时解法器库在不同的硬件和软件环境下（例如：商用 CPU 和自主 CPU、Linux 和 Windows 等）导致不同的计算结果（例如收敛迭代次数不一致），需要给出解决方案。

冯春生（湘潭大学，spring@xtu.edu.cn）

张晨松（中科院数学与系统科学研究院, zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

(S19-2) 如何设计异构体系结构上稀疏系统的高效求解器。现有的大多数解法器库都是面向同构系统（如：纯 CPU 系统）而开发的，但异构特征（CPU+加速卡、主核+从核等）是未来超级计算机的主流体系结构，而现有的很多算法（LU, ILU, CG, GMRES 等）在异构系统上效率很低，需要对现有算法的设计原则和实现技术进行改造，提出新的技术途径。

陈荣亮（中科院深圳先进技术研究院，rl.chen@siat.ac.cn）

(S19-3) 对于一般的多尺度 M 矩阵，是否可以与单尺度 M 矩阵或 Poisson 方程解得一样快。多尺度矩阵是指：同一行的非对角线元素在数值上相差很大（相差几个量级）。有很多实际问题会导致多尺度矩阵。对于单尺度 M 矩阵（例如由 Poisson 方程在均匀网格上离散得到的系统）或某些特定形式的多尺度 M 矩阵（例如各向异性 Poisson 方程），存在最优的算法（例如 MG 方法）。那么对于一般的多尺度 M 矩阵，是否存在最优计算复杂度的算法？（相关问题：**S18-4**）

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S19-4)[7,8] 如何设计解法器算法的自动化或智能化调优机制。现有的解法器算法

[6]刘伟峰教授 2019 年开始任职于中国石油大学（北京）。

策略是一种静态模式，即：对于给定一个问题，通过（先验的）数值分析，事先确定算法策略（选定某类算法和相关参数）进行求解，无法感知求解过程计算环境的变化（应用特征和机器特征）。如何设计一种自动或智能的调优机制，使得解法器能够根据计算环境的变化自动地选择最优的算法及参数。（相关问题：**S20-7**）

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S19-5) 如何标定实际应用问题解法器算法的能力，即：给定一个实际问题，如何确定算法空间及提升空间？

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）

(S19-6) 面向国产自主处理器的解法器研发，特别是支撑算法设计与并行实现及性能优化的协同研发模式等。

徐小文（北京九所，xwxu@iapcm.ac.cn）
张晨松（中科院数学与系统科学研究院, zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

● 2020（1-8）

(S20-1) 是否存在求解线性方程组的具有二阶收敛速度的迭代方法？对于非线性代数方程组，Newton 法是具有局部二阶收敛的迭代方法，收敛速度快，并且收敛速度与网格规模无关。目前，求解线性方程组的众多迭代方法中，基于矩阵分裂的迭代方法的收敛速度用迭代矩阵的谱半径进行刻画（分裂迭代方法是线性收敛的），Krylov 子空间方法类中有部分关于超线性收敛结果的讨论，没有看到具有二阶（或更高阶）收敛速度的迭代方法的讨论。

安恒斌（北京九所，an_hengbin@iapcm.ac.cn）

(S20-2) 关于矩阵测试库建设。国际上有类似于Matrix Market 和

---

[7]**相关进展**：该问题的部分内容 2019 年在挑战专题项目中设置了专门课题进行探索。
8**相关进展**：徐小文等针对 AMG 算法提出一个求解线性方程组序列的基于自适应 Setup 的 AMG 算法，可以根据序列中不同矩阵的性质采用不同的 Setup 策略。参考：X.Xu, et al (2020), aSetup-AMG: an adaptive- setup- based parallel AMG solver for sequence of sparse linear systems, CCF Trans. HPC,2: 98-110.

SuiteSparseMatrix Collection 等广泛使用的矩阵测试库，但国内对此类数据库的构建还几乎是空白。随着国内实际应用中产生的矩阵愈加复杂多变，亟需建立面向国内实际应用的测试矩阵数据库，从而牵引解法器相关算法研究。（相关问题：**S20-8**）

顾先明（西南财经大学，guxm@swufe.edu.cn）

岳孝强（湘潭大学，yuexq@xtu.edu.cn）

(S20-3)[9] 关于稀疏矩阵的稀疏结构、稀疏矩阵存储和计算方式、机器体系结构之间的最优映射。稀疏矩阵计算面临三个方面的复杂性：（1）矩阵的稀疏结构往往是非常不规则和难以预测的；（2）过去有很多存储和计算方式被提出并被验证适合于某些稀疏结构；（3）性能数据都高度依赖于所使用的并行和分布式的机器体系结构。这三方面的复杂度交织在一起，导致稀疏矩阵计算的性能调优极具挑战性。所以，如何实现稀疏矩阵稀疏结构、稀疏矩阵存储和计算方式、以及机器体系结构之间的最优映射是一个有趣的问题。

刘伟峰（中国石油大学，weifeng.liu@cup.edu.cn）

(S20-4) 稀疏矩阵计算的性能建模问题。探讨具体形式的稀疏矩阵计算实现的性能优化方向，或者通过自动调优方式来构建指定处理器架构及高性能计算系统上的最优稀疏矩阵计算实现都需要对不同矩阵特征（非零元分布甚至是数值特征）、不同算法、不同实现、特定架构及系统上的计算性能进行估计，而计算依赖、负载不均衡、非规则访存等问题也使得性能建模极具挑战，需要尝试寻找新的有效解决思路。

薛巍（清华大学，xuewei@mail.tsinghua.edu.cn）

(S20-5) 多精度和混合精度在科学计算应用中的可能性。当前，超级计算机采用多精度硬件构建（例如NVIDIA的GPU同时支持双精度、单精度和半精度，且性能差异大）已经成为一种重要趋势，人工智能领域硬件设计和模型构建在提倡精

---

[9] **相关进展：**关于稀疏矩阵计算性能优化的最新进展，可参见刘伟峰最近的综述文章：刘伟峰，高可扩展、高性能和高实用的稀疏矩阵计算研究进展与挑战，数值计算与计算机应用，青年评述，41(4): 259-281.

度工程的概念，可以预期精度问题将在未来影响关键领域软硬件的设计。当前，在科学计算领域更多关注双精度计算，对混合精度、变精度问题的考虑相对较少，已有工作也更多是实证型工作。建议关注此领域的进展，并从科学计算应用的精度评估标准和精度分析与实验工具等角度入手开展相关工作。

薛巍（清华大学，xuewei@mail.tsinghua.edu.cn）

(S20-6) 关于稀疏矩阵计算标准库的研发。目前，对于稠密矩阵计算，有统一的标准库，但对稀疏矩阵还没有类似的标准库。

谭光明（中科院计算技术研究所，tgm@ict.ac.cn）

(S20-7)[10,11] 实际应用场景下稀疏线性系统的算法选择问题。虽然线性解法器算法和实现研究是一个相当活跃的领域，但在实际应用场景中，算法的选择和具体使用策略却常常困扰应用领域的专家。这是因为，即使使用相同的抽象算法，算法的不同变形和参数选择对实际计算性能也有很大影响。如何针对一个具体应用问题，给出选择算法及参数的原则、步骤或自适应策略是一个开放性问题。（相关问题：**S19-4**）

张晨松（中科院数学与系统科学研究院, zhangcs@lsec.cc.ac.cn）

(S20-8) 面向实际应用的稀疏矩阵评测集与评测准则。面向重要行业应用，建立能反映行业应用特征的稀疏矩阵评测集，分别针对数值算法设计与性能优化，建立评测准则，牵引稀疏矩阵计算的算法设计与性能优化研究。（相关问题：**S20-2**）

Solver2020 程序委员会[12]（联系：xwxu@iapcm.ac.cn）

[10] **相关进展**：该问题的部分内容 2019 年在挑战专题项目中设置了专门课题进行探索。

[11] **相关进展**：徐小文等针对 AMG 算法提出一个求解线性方程组序列的基于自适应 Setup 的 AMG 算法，可以根据序列中不同矩阵的性质采用不同的 Setup 策略。参考：X.Xu, et al (2020), aSetup-AMG: an adaptive‐setup‐based parallel AMG solver for sequence of sparse linear systems, CCF Trans. HPC,2: 98-110.

[12] 该问题由参加 Solver2020（苏州）的部分程序委员会成员和专家在会上讨论提出，包括：安恒斌、崔涛、冯春生、何鑫、胡俊、胡少亮、荆燕飞、刘伟峰、舒适、谢和虎、徐小文、薛巍、岳孝强、张晨松、钟柳强、朱圣鑫等。