大规模特征值问题代数解法器的一些研究

王紫菁

摘要

特征值问题常出现于材料科学、工程计算、动力系统和数据科学等领域，电子结构计算、桥梁稳定性分析和复杂结构共振模态分析等问题都涉及大规模特征值问题的求解。特征值问题的数值求解算法是目前科学与工程计算中的主要研究内容之一。本文主要研究大规模代数特征值问题的高效求解算法及其解法器。

GCG 算法结合了阻尼块反幂法和子空间投影方法的思想，其相应的软件包 GCGE 在求解大规模代数特征值问题上表现出了良好的稳定性、高效性和并行可扩展性。本文首先介绍了 GCG 算法的设计思路及算法流程，然后提出了求解 Rayleigh-Ritz 问题的移动策略和基于奇异值分解的递归块正交化方法的优化策略，进一步提升了 GCGE 的求解效率。

此外本文还介绍了新版本的大规模代数特征值解法器 GCGE 的编程框架和使用规则。通过与 SLEPc 软件包中的 LOBPCG 和 Krylov-Schur 的数值比较，展示了 GCGE 在计算效率、稳定性和并行可扩展性的优势。最后介绍了将 GCGE 作为外部特征值解法器嵌入 SLEPc 的方式和过程，同时给出了在 SLEPc 下调用外部解法器的流程和相应规则。在嵌入的基础上，通过与 SLEPc 的内置解法器 LOBPCG 的比较也展示了 GCGE 的计算效率。

关键字：特征值问题，GCG 算法，GCGE，并行计算，优化策略