

GCGE in Baltamatica

Zijing Wang* and Hehu Xie†

*ICMSEC, LSEC, NCMIS, Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China, and School of Mathematical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China (zjwang@lsec.cc.ac.cn).

†ICMSEC, LSEC, NCMIS, Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China, and School of Mathematical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China (hxie@lsec.cc.ac.cn).

1 稀疏矩阵特征值解法器 GCGE 接口

王紫菁 zjwang@lsec.cc.ac.cn 谢和虎 hhxie@lsec.cc.ac.cn

1.1 编译和调用方式

1. (1) 进入 GCGE_BEX/test, 在北太天元的命令行执行编译脚本, 得到北太天元下的可执行文件 gcge_bex.bexw64, 这个后缀跟具体的编译环境有关

```
1  makefile_baltam
```

2. (2) 测试算例见脚本 testgcge.m

```
1  nev=10;           %计算的特征对个数
2  abs_tol=1e-8;     %绝对残差精度
3  rel_tol=1e-2;     %相对残差精度
4  numIterMax=200;   %算法最大迭代次数
5
6  %gcg 算法内部参数会影响算法的计算效率
7  nevMax=2*nev;     %gcg 算法内部参数
8  blockSize=nev / 2; %gcg 算法内部参数
9  nevInit= 2*nev;   %gcg 算法内部参数
10 gapMin=1e-5;      %gcg 算法内部参数
11 maxcg = 9;        %gcg 算法内部参数
12 tic;
13 %调用GCGE
14 eval = gcge_bex(A,nev,abs_tol,rel_tol,...
15     nevMax,blockSize,nevInit,...
16     numIterMax,gapMin,maxcg);
17 toc
```

上述脚本中的调用方式列出了 gcge_bex 接口的所有参数, 用户也可以通过以下方式调用

```
1  D = gcge_bex(A);    %返回前k个最小的特征值
2  D = gcge_bex(A,k);  %返回前k个最小的特征值
3  D = gcge_bex(A,___); %可以选择指定额外的参数
4  [D, V] = gcge_bex(A); %返回前k个最小的特征值和特征向量
5  [D, V] = gcge_bex(A,k); %返回前k个最小的特征值和特征向量
6  [D, V] = gcge_bex(A,___); %可以选择指定额外的参数
```

1.2 测试结果

测试环境: Windows11, 处理器为 2.5GHz 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-11700, 内存 32GB.
测试矩阵: 来自稀疏矩阵库的实对称矩阵, 它们都是测试大规模稀疏矩阵特征值解法器性能常用的矩阵.

表 1: 各解法器计算矩阵前 10 个特征对的计算时间 (秒)

矩阵	矩阵维数	nev	eigs(MATLAB)	GCGE_BEX	加速比
Si5H12	19,896	10	24.02	2.57	9.34
Andrews	60,000	10	28.19	3.48	8.10
Ga3As3H12	61,349	10	331.39	16.83	19.69
Si34H36	97,569	10	943.57	20.06	47.04
Ga10As10H72	113,081	10	1501.31	22.54	66.60
Ga19As19H42	133,123	10	12300.43	38.63	318.41
Ga41As41H72	268,096	10	OFM	132.23	—

表 2: 各解法器计算矩阵前 100 个特征对的计算时间 (秒)

矩阵	矩阵维数	nev	eigs(MATLAB)	GCGE_BEX	加速比
Si5H12	19,896	100	66.24	17.08	3.87
Andrews	60,000	100	84.29	30.53	2.76
Ga3As3H12	61,349	100	646.74	147.54	4.38
Si34H36	97,569	100	1630.02	94.63	17.22
Ga10As10H72	113,081	100	3597.03	180.08	19.97
Ga19As19H42	133,123	100	OFM	251.24	—
Ga41As41H72	268,096	100	OFM	582.04	—

说明:

1. Matlab 调用 eigs 求解时的命令为

```
1 D = eigs(A, nev, 'smallestabs', 'Tolerance', 1e-8);
```

以上测试中 GCGE 和 eigs 的收敛准则都是 $\text{abs_tol} < 1e-8$, abs_tol 表示绝对残差 $\|Ax - \lambda x\|$.

2. 由于部分矩阵是不定的, GCGE 在计算之前可以对这些矩阵做位移操作 $A \leftarrow A + \theta I$ 以让矩阵保持正定. 在调用 eigs 时对矩阵做同样的处理.
3. 表中 OFM 表示”out of memory”.

表 3: 各解法器计算矩阵前 800 个特征对的计算时间 (秒)

矩阵	矩阵维数	nev	eigs(MATLAB)	GCGE_BEX	加速比
Si5H12	19,896	800	296.57	139.97	2.11
Andrews	60,000	800	684.90	236.18	2.89
Ga3As3H12	61,349	800	2351.49	966.48	2.43
Si34H36	97,569	800	5137.77	848.39	6.05
Ga10As10H72	113,081	800	24059.46	1504.73	15.98
Ga19As19H42	133,123	800	OFM	2132.40	—
Ga41As41H72	268,096	800	OFM	4768.79	—

4. 表格中的计算时间均不含稀疏矩阵格式转换的时间。
5. 为了展现 GCGE 的计算效率, 我们这里直接与 Matlab 环境下的 eigs 进行对比。

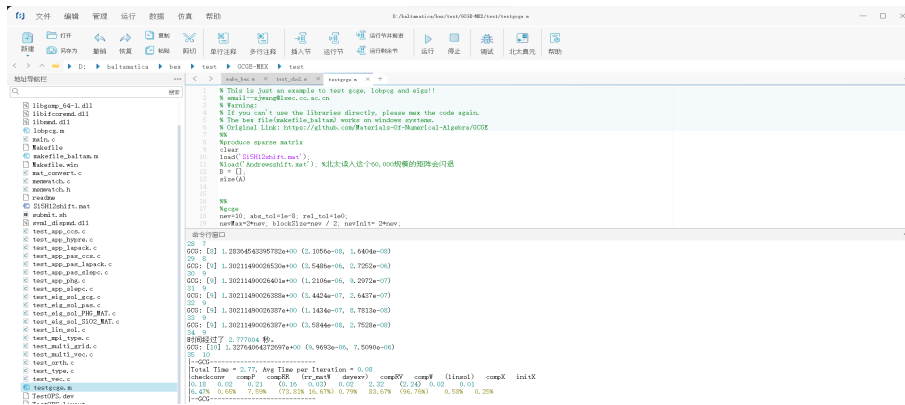


图 1: 北太天元环境下用 GCGE 计算 Si5H12 矩阵前 10 个特征值的运行界面

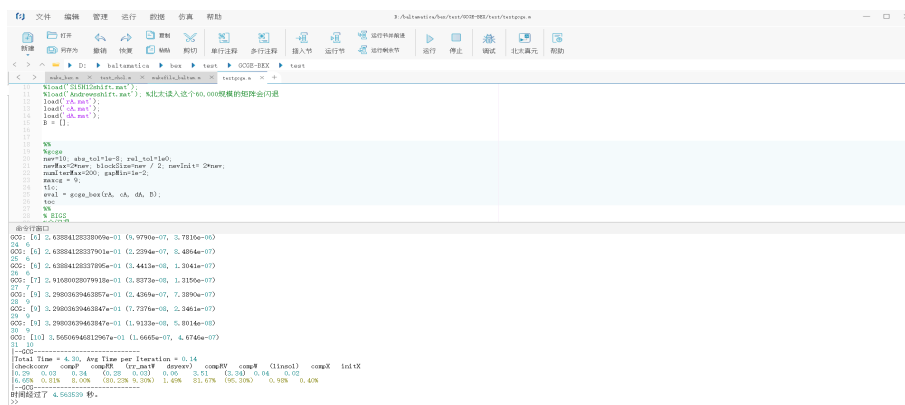


图 2: 北太天元环境下用 GCGE 计算 Andrews 矩阵前 10 个特征值的运行界面