1.15. Диагонализация больших матриц

Инвариантные подпространства. Матрица Рэлея. Процедура Рэлея – Ритца. Подпространство Крылова. Алгоритм Ланцоша

Постановки задач

- Размерность узельного базиса для бозе-системы из 12 узлов и 12 частиц:

$$R = \frac{23!}{12!\ 11!} = 1352078$$

- при решении квантовых многочастичных задач редко приходится вычислять все *собственные пары* (собственный вектор и отвечающее ему собственное значение) гамильтоновой матрицы
- <u>Обычные постановки задач:</u>
- Вычисление некоторых собственных значений, принадлежащих некоторому интервалу, или крайних собственных значений (например, *низ спектра*)
- Нахождение некоторых собственных пар
- Определение всех собственных значений или большого их количества без вычисления собственных векторов
- Одним из самых мощных методов диагонализации симметричных матриц является *алгоритм Ланцоша*

Пространства и инвариантные подпространства

- Скалярное произведение двух вещественных векторов:

$$(x, y) = y^T x = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i$$

- *Линейная оболочка,* натянутая на векторы s_1, s_2, ... :

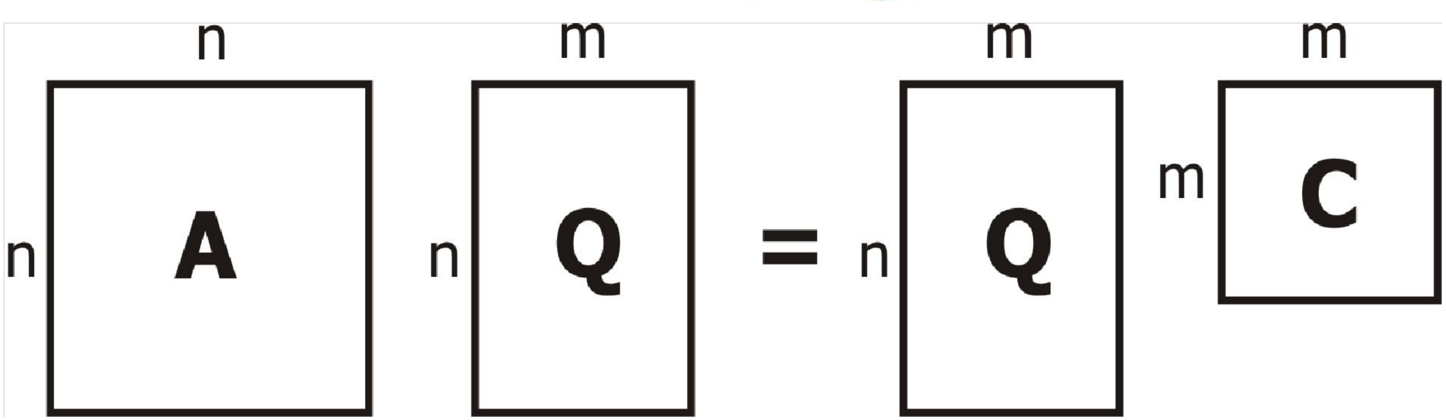
$$\Sigma = \operatorname{span}(s_1, s_2, \dots) = \operatorname{span}(S)$$

- Множество S называется *образующим множеством* подпространства Σ
- Образующее множество, содержащее наименьшее количество векторов, называется *базисом* подпространства, а количество векторов базиса называется *размерностью* подпространства
- Если базисные векторы ортонормированны, то базис называется *ортонормированным*
- Подпространство Σ *инвариантно относительно* A, если для любого вектора x из Σ следует, что вектор Ax также принадлежит Σ

Матрица Рэлея

- Пусть $Q=(q_1,q_2,\ldots,q_m)$ – векторы ортонормированного базиса инвариантного подпространства Σ, упорядоченные в виде матрицы Q размера $n\times m$
- Матрица Рэлея C – *сужение* A на Σ:

$$AC = QC$$



- Матрица Рэлея является симметричной
- Определение собственных пар матрицы A может быть осуществлено путем диагонализации матрицы C меньшего размера:

$$Cy = \lambda y \quad \Rightarrow \quad A(Qy) = \lambda(Qy)$$

Процедура Рэлея – Ритца

- Процедура Рэлея – Ритца обеспечивает наилучшее приближение к собственным парам матрицы A

- **1.** Ортонормализация матрицы Q, вычисление матрицы Рэлея

$$H = Q^T A Q$$

- Матрица Рэлея H почти инвариантна относительно A
- **2.** Определение требуемого количества собственны пар матрицы H:

$$Hh_i = \mu_i h_i; \quad i = 1, \dots, k$$

- **3.** Полученные *значения Ритца* μ_i будут наилучшими приближениями к собственным значениям матрицы A, а векторы Ритца

$$x_i = Qh_i$$

– соответствующими приближениями к собственным векторам матрицы A

Подпространство Крылова

- Подпространство Крылова для произвольного ненулевого вектора b:

$$K^m = \mathrm{span}(b, Ab, A^2 b, \dots, A^{m-1} b)$$

- При достаточно большом m подпространство Крылова будет посчти инвариантно относительно A
- В этом случае матрица Рэлея является трехдиагональной, и вычисление пар Ритца существенно упрощается
- Столбцы матрицы Q могут быть связаны друг с другом с помощью трехчленных рекуррентных соотношений, позволяющих вычислять новые векторы базиса Q
- Алгоритм Ланцоша обычно использует последовательность подпространств Крылова

$$K^1, K^2, \dots, K^m$$

и вычисляет пары Ритца матрицы A, отвечающие каждому из этих подпространств. Сходимость значений собственных пар обычно оказывается достаточно быстрой:

$$m \approx 2\sqrt{n}$$

Алгоритм Ланцоша

- Стартовый вектор b выбирается либо в произвольном виде, либо с использованием априорной информации о собственных векторах матрицы A:

$$q_0 = 0; \quad r_0 = b; \quad \beta_0 = \|b\|$$

- **1.** Пополнение ортонормированного базиса:

$$\frac{r_{m-1}}{\beta_{m-1}} \longrightarrow q_m$$

- **2.** Вычисление промежуточной невязки:

$$Aq_m - \beta_{m-1} q_{m-1} \longrightarrow r_m$$

- **3.** Вычисление очередного диагонального элемента:

$$q_m^T r_m \longrightarrow \alpha_m$$

- **4.** Завершение вычисления невязки:

$$r_m - \alpha_m q_m \longrightarrow r_m$$

- **5.** Вычисление нормы невязки:

$$\|r_m\| \longrightarrow \beta_m$$

Алгоритм Ланцоша

- Пары Ритца, аппроксимирующие собственные пары матрицы A:

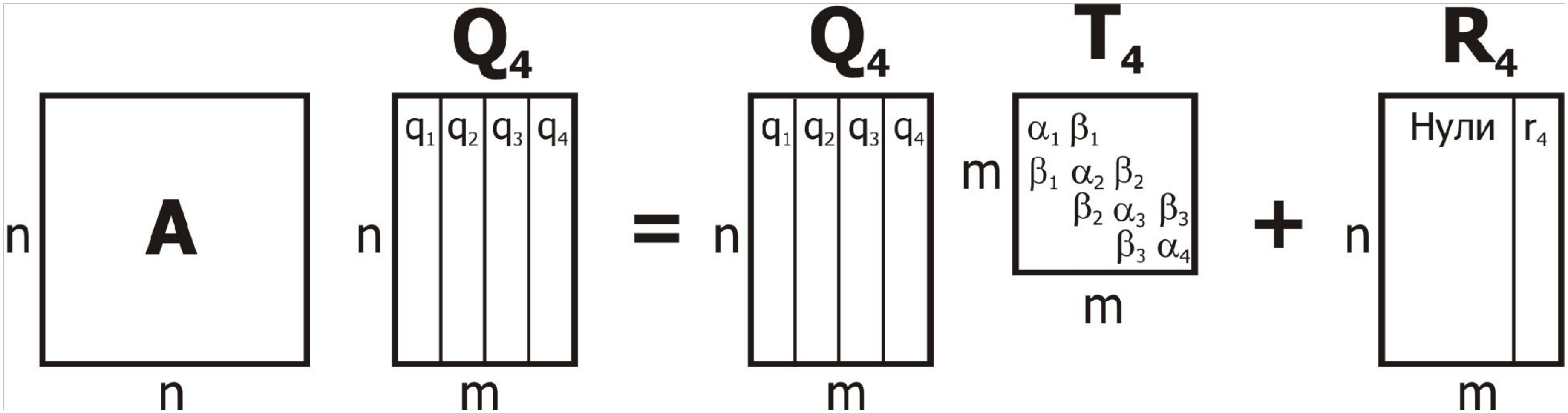
$$T_m h_i = \mu_i h_i; \quad i = 1,2,\dots,k; \quad k \le m$$
$$x_i = Q_m h_i$$

- Контроль сходимости – норма вектора невязки:

$$\|Ax_i - \mu_i x_i\| = \|(AQ_m - Q_m T_m)h_i\| = \|R_m h_i\| = \|r_m h_{im}\| = \beta_m |h_{im}|$$

- Существуют версии алгоритма Ланцоша, предназначенные для отыскания крайних собственных значений, некоторых внутренних собственных значений и даже всех собственных значений симметричных или эрмитовых матриц очень больших размеров, некоторые версии алгоритма позволяют вычислять и соответствующие собственные векторы
- При практической реализации алгоритма Ланцоша возникают погрешности, связанные с машинной точностью обработки чисел двойной точности. Для решения этой проблемы разработаны специальные модификации алгоритма, производящие переортогонализацию векторов в зависимости от величины погрешности

Пример



- Для случая m=4:

$$\begin{cases} Aq_1 = \qquad\qquad \alpha_1 q_1 + \beta_1 q_2; \\ Aq_2 = \beta_1 q_1 + \alpha_2 q_2 + \beta_2 q_3; \\ Aq_3 = \beta_2 q_2 + \alpha_3 q_3 + \beta_3 q_4; \\ Aq_4 = \beta_3 q_3 + \alpha_4 q_4 \qquad + r_4 \end{cases}$$

Пример

- Матрица T – трехдиагональная. Из ее определения получаем:

$$\alpha_4 = q_4^T A q_4; \quad \beta_3 = q_3^T A q_4; \quad r_4 = Aq_4 - (q_3^T A q_4) q_3 - (q_4^T A q_4) q_3$$

$$q_5 = \frac{r_4}{\beta_4}; \quad \beta_4 = \|r_4\|$$

- Рекуррентные соотношения:

$$Aq_i = \beta_{i-1} q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_i q_{i+1}; \quad i \le m;$$

- В случае i=m определяется вектор невязки:

$$i = m: \; r_m = \beta_m q_{m+1}$$