

Przekształcenie przez podobieństwo

Diagonalizacja macierzy

Monika Musiał

Zakład Chemii Teoretycznej

Uniwersytet Śląski

Macierz A i B noszą nazwę macierzy podobnych, jeżeli istnieje taka macierz C , że:

$$C^{-1}AC = B \quad (1)$$

Przekształcenie przez podobieństwo

Dla każdej macierzy hermitowskiej istnieje przekształcenie przez podobieństwo, które przeprowadza ją w macierz diagonalną. Macierz tego przekształcenia jest macierzą unitarną a samo przekształcenie nazywane jest najczęściej przekształceniem unitarnym. Jeżeli przez H oznaczymy macierz hermitowską a przez C macierz unitarną tego przekształcenia to powyższe stwierdzenie można zapisać:

$$C^{-1}HC = D \quad (2)$$

gdzie D jest macierzą diagonalną.

Przekształcenie przez podobieństwo

Wyberzmy teraz z macierzy C i -tą kolumnę, tzn. macierz jednokolumnową C_i i dokonajmy przy jej pomocy tej samej operacji na macierzy H :

$$C_i^{-1}HC_i = d_i \quad (3)$$

Otrzymamy w rezultacie i -ty element diagonalny macierzy D . Na podstawie równania (3) dochodzimy do wniosku, że:

$$HC_i = d_iC_i \quad (4)$$

Przekształcenie przez podobieństwo

Jeżeli elementy jednokolumnowej macierzy C_i potraktujemy jako składowe pewnego wektora w przestrzeni n -wymiarowej to równość (4) interpretujemy następująco:

macierz H działając na wektor przedstawiony w postaci jednokolumnowej macierzy C_i przeprowadza go w ten sam wektor pomnożony przez pewną liczbę d_i . Mówimy wówczas, że wektor C_i jest wektorem własnym macierzy H z wartością własną d_i . Wektory własne są więc kolumnami macierzy C .

Ogólniej możemy zapisać wniosek (4) w postaci:

$$HC = CD \quad (5)$$

gdzie C jest macierzą wektorów własnych,
natomiast D macierzą diagonalną wartości własnych
odpowiadających kolejnym wektorom macierzy C .

Znajdowanie wartości własnych

Problem znalezienia wartości własnych sprowadza się w takim ujęciu do utworzenia odpowiedniej macierzy C , spełniającej:

$$HC = CD \quad (6)$$

lub diagonalizującej macierz H w przekształceniu unitarnym:

$$C^{-1}HC = D \quad (7)$$

Jeśli dla danej macierzy H istnieje taka macierz C , że:

$$C^{-1}HC = D \quad (8)$$

to mówimy, że macierz H jest diagonalizowalna a powyższa operacja to **diagonalizacja macierzy**.

Diagonalizacja macierzy

Diagonalizacja macierzy jest jednym z bardzo ważnych etapów obliczeń w chemii kwantowej.

Istnieje wiele metod diagonalizacji macierzy symetrycznych jak i niesymetrycznych.

Dla macierzy symetrycznych głównymi metodami diagonalizacji są:

- metoda Jacobiego
- metoda Householdera
- metoda Davidsona

Dla macierzy niesymetrycznych:

- metoda QR
- metoda Hiraó i Nakatsujego

Diagonalizacja macierzy

Metoda Jacobiego, Householdera i QR charakteryzują się tym, iż proces diagonalizacji pozwala znaleźć wszystkie wartości własne i wektory własne.

Natomiast metoda Davidsona oraz jej uogólnienie na macierze niesymetryczne, czyli metoda Hirao i Nakatsujego, umożliwia znajdowanie tylko wybranych wartości własnych i wektorów własnych. Ta ostatnia grupa metod jest stosowana w przypadkach dużych czy też bardzo dużych macierzy (macierze o stopniu równym kilku milionom).

Diagonalizacja dużych macierzy

Stosowana technika diagonalizacji

Metoda Davidsona

Diagonalizacja dużych macierzy

Chcemy otrzymać niewielką liczbę wartości własnych i wektorów własnych.

Diagonalizacja macierzy

Dla przejrzystości oznaczeń zakładamy, że:

- macierze kwadratowe oznaczamy kolorem czerwonym, np. A , \tilde{A} .
- wektory (macierze jednokolumnowe) są oznaczone kolorem niebieskim, np. b_i , c_i , d_i , e_i , x_i , y_i .
- liczby (elementy macierzy) oznaczamy kolorem czarnym, np. A_{ri} , b_{ri} , α_{ri} .

Diagonalizacja macierzy

Metoda Davidsona

A: macierz diagonalizowana

Musimy zacząć od wektora startowego

$$b(\text{begin}) = b_0$$

Wtedy w każdej iteracji konstruujemy (zgodnie ze wzorem Davidsona) nowy wektor b_i oraz wektor c .

Metoda Davidsona

Wektor c , jest przybliżeniem prawdziwego wektora własnego macierzy A jako liniowa kombinacja dotychczas znalezionych wektorów b :

$$c = \sum_r \alpha_r b_r$$

Metoda Davidsona

Główną ideą metody Davidsona jest konstrukcja małej macierzy \tilde{A} , której elementy dane są wzorem:

$$\tilde{a}_{ij} = \langle b_j | x_i \rangle$$

$$x_i = Ab_i$$

Diagonalizacja macierzy

Ogólny schemat znajdowania przybliżonych wartości i wektorów własnych macierzy A

- znając n wektorów $\{b_1, b_2, \dots, b_n\}$;
- konstruujemy n wektorów $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$;
- oraz macierz \tilde{A} , jako:

$$\tilde{a}_{ij} = \langle b_i | x_j \rangle ;$$

- diagonalizujemy macierz \tilde{A} otrzymując n wartości własnych $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ oraz n wektorów własnych $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$

Diagonalizacja macierzy

Ogólny schemat znajdowania przybliżonych wartości i wektorów własnych macierzy A

- jedna z wartości własnych (np. λ_i) przybliża (poszukiwaną) wartość własną macierzy A , a odpowiadający jej wektor własny $\{\alpha_i\}$ wykorzystywany jest do wyznaczania przybliżonego wektora własnego macierzy A , c_i , jako:

$$c_i = \sum_r \alpha_{ri} b_r$$

Konstrukcja wektora Davidsona

Jeżeli wektor c_j jest wektorem własnym macierzy A to powinien spełniać równanie:

$$Ac_j = \lambda_j c_j$$

lub

$$Ac_j - \lambda_j c_j = 0$$

Jeżeli λ_j oraz c_j są tylko przybliżeniami to można zdefiniować wektor różnic (błędów) e_{ri} jako:

$$e_{ri} = y_{ri} - \lambda_j c_{ri} = 0$$

$$y_j = Ac_j$$

Konstrukcja wektora Davidsona

Jeżeli wektor różnic jest równy 0 lub jest niższy od pewnej wartości progowej to równanie własne jest rozwiązane. Jeżeli nie to konstruujemy wektor Davidsona d_j jako:

$$d_{ri} = \frac{e_{ri}}{\lambda_i - A_{rr}}$$

Wektor d_j po zortogonalizowaniu do istniejących n wektorów $\{b_i\}$ dołącza się do istniejących przestrzeni rozpinanej przez wektor $\{b_i\}$, tzn. staje się wektorem b_{n+1} .

Metoda równań ruchu sprzężonych klasterów (EOM-CC)

W praktycznych realizacjach metod EOM-CC macierz $\bar{\mathbf{H}}_N$ jest stosunkowo duża w związku z tym podstawową techniką diagonalizacyjną okazuje się być metoda Davidsona uogólniona dla macierzy niesymetrycznych, która nie wymaga konstruowania i przechowywania w pamięci komputera diagonalizowanej macierzy.

Diagonalizacja macierzy

Metoda równań ruchu sprzężonych klasterów (EOM-CC)

Jak wspomniano wcześniej najważniejszym etapem diagonalizacji Davidsona jest wyznaczenie wektora \mathbf{x}_k , będącego iloczynem diagonalizowanej macierzy \mathbf{A} oraz wektora $\mathbf{b}(\mathbf{k})$, który jest przybliżeniem poszukiwanego wektora własnego:

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{A}\mathbf{b}(\mathbf{k}) \quad (9)$$

W metodzie EOM-CC wektor $\mathbf{b}(\mathbf{k})$ jest wektorem amplitud $\mathbf{R}(\mathbf{k})$ a macierz \mathbf{A} jest macierzą $\bar{\mathbf{H}}_N$, czyli

$$\mathbf{x}_k = \bar{\mathbf{H}}_N \mathbf{R}(\mathbf{k}) \quad (10)$$

Diagonalizacja macierzy

Metoda równań ruchu sprzężonych klasterów (EOM-CC)

Wektor \mathbf{x}_k możemy wyznaczyć mnożąc macierz $\bar{\mathbf{H}}_N$ przez wektor $\mathbf{R}(k)$ albo biorąc kontrakcje pomiędzy operatorami \bar{H}_N i $R(k)$. Drugie podejście jest korzystniejsze gdyż umożliwia pominięcie etapu tworzenia dużej macierzy \mathbf{H}_N .

Wektor \mathbf{x}_k możemy więc zapisać jako:

$$x_{ij\dots}^{ab\dots}(k) = \langle \Phi_{ij\dots}^{ab\dots} | (\bar{H}_N R(k))_c | \Phi_0 \rangle \quad (11)$$

Tak więc konstrukcja równań metody EOM-CC sprowadza się do wygenerowania wkładów, najczęściej w postaci diagramatycznej, wynikających z powyższego równania.