

# Die Lanczos Methode

Wiebke Plenkens

29. Mai 2008

# Inhaltsverzeichnis

- 1 Einführung
  - Motivation
  - Exakte Diagonalisierung
- 2 Die Power-Methode
  - Idee
  - Mathematische Vorgehensweise
- 3 Lanczos Methode
  - Mathematische Vorgehensweise
  - Beweis der Orthogonalität
  - Lanczos-Basis
  - Lanczos Vor- und Nachteile
  - Anwendung der Lanczos-Methode
  - Cornelius Lanczos
- 4 Anhang

## Motivation

- Für die genaue Beschreibung von Vielteilchensystemen wird oft eine exakte Diagonalisierung des Hamiltonoperators gewünscht, z.B. bei der Beschreibung von Systemen Kondensierter Materie geringer Energie.
- Betrachte die Konfiguration von Teilchen auf  $N$  Gitterpunkten mit jeweils  $s$  Basiszuständen

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\alpha_j\}} \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N) |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

- Dimension der resultierenden Hamilton Matrix:  $\prod_{j=1}^N s_j$

### Problem der Hamiltonmatrix

Die Dimension der Basis eines Vielteilchensystems wächst exponentiell mit  $N$ !

## Kurze Erinnerung an den Hamiltonoperator H

- Ein Ansatz QM-Systeme zu lösen ist der, die Eigenwerte von H zu finden, also Lösen der Eigenwertgleichung
- H als Matrix :  $H_{ij} = \langle \mathbf{v}_i | H | \mathbf{v}_j \rangle$
- H kann verschiedene Subsysteme miteinander verbinden
$$H = \sum_l H_l^1 + \sum_{l,m} H_{l,m}^2 + \dots + \sum_{l,m,n,p} H_{l,m,n,p}^4 + \dots$$
- Beispiele:
  - simple tight-binding chain mit nearest-neighbour hopping
$$H^{t,b} = - \sum_{i,j} t_{i,j} (c_{j+1}^+ c_j + c_j^+ c_{j+1})$$
  - mit Betrachtung des Spins : Hubbard model
$$H = -t \sum_{j,m,\sigma} (c_{j,\sigma}^+ c_{m,\sigma} + c_{m,\sigma}^+ c_{j,\sigma}) + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow}$$
  - des Weiteren gibt es z.B. Anderson Hamiltonien, Heisenberg Hamiltonien und mit Defekten z.B. das Kondo Model

# Exakte Diagonalisierung

- Exakte Diagonalisierung = numerischer Ansatz zum Finden des exakten Ergebnisses für ein finites Gitter-System durch direkte Diagonalisierung von  $H$
- 1) Einfachster Ansatz: Komplette Diagonalisierung, Problem: exponentieller Wachstum von  $H$
- Lösen von  $\det(H - \lambda E) = 0$
- 2) Wenn nur niedrigen oder hohen Eigenzustände gesucht werden: Iterative Diagonalisierungs- Methoden
- Extreme Verkleinerung der Matrixdimension durch Projektion
- $H$  wird durch die Benutzung von Symmetrien so weit wie möglich vereinfacht

# Exakte Diagonalisierung

## Beispiel der Dimensionsreduktion von H, N=40, Heisenberg-H

gesamter Hilbertraum:  $\dim = 2^{40} = 10^{12}$

Beschränkung auf  $S_{z=0}$   $\dim = 138 * 10^9$

Nutzung der Spininversion:  $\dim = 69 * 10^9$

Nutzung von 4 Translationen:  $\dim = 1,7 * 10^9$

Nutzung aller 4 Rotationen:  $\dim = 430909650$

- Zur Berechnung auf Computern wird ein Zustand meist in einem Bit, bzw. einem Satz von Bits gespeichert
- Bisher können auf 'normalen' Computern berechnet werden:
- Spin 1/2 - Modelle N=40 (lattice verschiedener Geometrien)
- Hubbard Modelle mit Halbfüllung N=20

# Komplette Diagonalisierung

- Komplette Diagonalisierung wird z.B. in einem Schritt von DMRG gebraucht (Diagonalisierung der Dichtematrix)
- $\exists$  bekannte Programme für KD, wie z.B. LAPACK
- Solche Programme können zwar auch genutzt werden, um H zu diagonalisieren, aber sie sind weniger effizient als Iterative Methoden
- Grenzen von kompletter Diagonalisierung: Die gesamte Matrix muss gespeichert und diagonalisiert werden (  $\rightarrow$  exp.-Wachstum!)
- Bsp. Hubbard-Kette: 10 (20) Plätze mit Supercomputer möglich (mit Symmetriebetrachtung)
- 1-D Systeme mit 1000 Plätzen mit DMRG auf normalem Computer

## Iterative Diagonalisierung

### Idee

Projektion der Matrix  $H$  auf einen Unterraum der Dimension  $M \ll N$  !! (typisch auf  $M = 100$ )

- Der Unterraum muss dabei so gewählt sein, dass die extremen Eigenwerte innerhalb des Unterraums sehr schnell mit  $M$  zu den extremen Eigenwerten des Systems konvergieren
- Bedingung: Nur der Grundzustand und die niedrigen Anregungszustände werden gesucht
- Es gibt viele starke iterative Diagonalisierungs Prozeduren
- In der Physik sehr bekannt: die Lanczos-Methode
- So wie die meisten iterativen Diagonalisierungs-Methoden beruht auch die Lanczos-Methode auf der Power-Methode



## Die Power-Methode : Idee

- Sehr einfache Methode zum Finden des höchsten Eigenwerts mit entsprechendem Eigenvektor einer  $n \times n$ -Matrix
- Idee: Iterative Diagonalisierungs Methode
- Voraussetzung:
  - $A_{n \times n}$  hat  $n$  linear unabhängige Eigenvektoren
  - $A_{n \times n}$  hat einen dominanten Eigenwert
- Speicher-Vorteil: sehr effizient, da nur zwei Vektoren gespeichert werden müssen  $\mathbf{u}_i$  und  $\mathbf{u}_{i-1}$

## Mathematische Vorgehensweise

- Sei  $X$  ein beliebiger Vektor :  $X_0 = c_1 V_1 + c_2 V_2 + \dots + c_n V_n$  mit  $\{V_1, V_2, \dots, V_n\}$  sind linear unabhängige Eigenvektoren
- Daraus folgt:

$$AX_0 = c_1 \lambda_1 V_1 + c_2 \lambda_2 V_2 + \dots + c_n \lambda_n V_n$$

$$A^2 X_0 = c_1 \lambda_1^2 V_1 + c_2 \lambda_2^2 V_2 + \dots + c_n \lambda_n^2 V_n$$

.....

$$A^m X_0 = c_1 \lambda_1^m V_1 + c_2 \lambda_2^m V_2 + \dots + c_n \lambda_n^m V_n$$

dividiere durch  $\lambda_1^m \Rightarrow$

$$\frac{1}{\lambda_1^m} A^m X_0 = c_1 V_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^m V_2 + \dots + c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^m V_n$$

wird nun  $m$  immer größer, so gehen die Brüche  $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^m$  gegen Null

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{\lambda_1^m} A^m X_0 = c_1 V_1$$

# Mathematische Vorgehensweise

- Ebenso verfährt man mit  $m+1$
- Bilde nun jeweils das Skalarprodukt mit einem beliebigen, nicht zu  $V_1$  orthogonalen Vektor  $Y$

$$\frac{1}{\lambda_1^m} A^m X_0 Y = c_1 V_1 Y$$

$$\frac{1}{\lambda_1^{m+1}} A^{m+1} X_0 Y = c_1 V_1 Y$$

- Gleichsetzen ergibt:

$$\frac{A^{m+1} X_0 Y}{A^m X_0 Y} = \frac{\lambda_1^{m+1}}{\lambda_1^m} = \lambda_1$$

- Die Power-Methode generiert den sogenannten Krylov-Unterraum :

$$K_n = \text{span}\{\mathbf{u}_0, H\mathbf{u}_0, \dots, H^{n-1}\mathbf{u}_0\}$$

# Lanczos Methode

Gegeben sei eine Matrix  $H$ , zu der der minimale Eigenwert  $\lambda$  mit dem Eigenvektor  $\mathbf{x}$  gesucht wird :  $H\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$

Idee: benutze den  $n$ -ten Krylov-Raum (Dimension  $n$ )

$K_n = \text{span}\{\mathbf{u}_0, H\mathbf{u}_0, \dots, H^{n-1}\mathbf{u}_0\}$  mit einem beliebigen Startvektor  $\mathbf{u}_0$

konstruiere daraus eine orthogonale (nicht orthonormale Basis) von  $K_n : \{\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}\}$

Nun werden die Zustände der Lanczos-Basis mit folgender Rekursionsrelation gefunden:

$$\mathbf{u}_{i+1} = H\mathbf{u}_i - a_i\mathbf{u}_i - b_i^2\mathbf{u}_{i-1} \text{ für } i=0, \dots, n-1$$

$$\text{mit } a_i = \frac{\mathbf{u}_i^T H\mathbf{u}_i}{\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i} \text{ für } i=0, \dots, n-1$$

$$\text{und } b_i^2 = \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i}{\mathbf{u}_{i-1}^T \mathbf{u}_{i-1}} \text{ für } i=1, \dots, n-1$$

Man wählt die Startwerte:  $\mathbf{u}_{-1} = 0, b_0 = 0$

Damit gilt  $\mathbf{u}_i \in K_n$  für  $i=0, \dots, n-1$

Diese Rekursionsrelation wird nun wiederholt, bis die Vektoren zu einer beliebigen Genauigkeit konvergieren, dann  $n=M$  (maximale Dimension)

$$\mathbf{u}_{i+1} = H\mathbf{u}_i - \left(\frac{\mathbf{u}_i^T H\mathbf{u}_i}{\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i}\right)\mathbf{u}_i - b_i^2 \mathbf{u}_{i-1} \text{ für } i=0, \dots, n-1$$

Das Ergebnis ist eine Tridiagonale Matrix:

$$T_n = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & & & \mathbf{0} \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & b_2 & a_2 & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & b_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & b_{n-1} & a_{n-1} \end{pmatrix}$$

Von dieser Tridimensionalen Matrix kann man nun numerisch leicht die Eigenwerte finden:

$$\det(H_0) = a_0 \det(H_1) - b_1^2 \det(H_2)$$

$$\frac{\det(H_1)}{\det(H_0)} = \frac{1}{a_0 - b_1^2 \frac{\det(H_2)}{\det(H_1)}}$$
$$\Rightarrow \frac{\det(H_i)}{\det(H_{i-1})} = \frac{1}{a_0 - b_1^2 \frac{\det(H_{i+1})}{\det(H_i)}}$$

Diese Iteration kann numerisch leicht gelöst werden

## Beweis der Orthogonalität

Induktionsvoraussetzung:

$\{\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}\}$  ist orthogonal

damit ist

$$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i^T (H\mathbf{u}_i - a_i \mathbf{u}_i - b_i^2 \mathbf{u}_{i-1}) = a_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i - a_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i - 0 = 0$$

und für  $j=0, \dots, i-1$

$$\mathbf{u}_j^T \mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{u}_j^T (H\mathbf{u}_i - a_i \mathbf{u}_i - b_i^2 \mathbf{u}_{i-1}) = \mathbf{u}_j^T H\mathbf{u}_i - b_i^2 \mathbf{u}_j^T \mathbf{u}_{i-1}$$

$$= \mathbf{u}_i^T H\mathbf{u}_j - b_i^2 \mathbf{u}_j^T \mathbf{u}_{i-1}$$

$$= \mathbf{u}_i^T (a_j \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1} + b_i^2 \mathbf{u}_{i-1}) - b_i^2 \mathbf{u}_j^T \mathbf{u}_{i-1}$$

$$= \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_{j+1} - b_i^2 \mathbf{u}_j^T \mathbf{u}_{i-1} = 0$$

da bei  $j = i - 1$  die Definition von  $\mathbf{u}_{i+1}$  greift

und für  $j < i - 1$  Orthogonalität gilt

$\Rightarrow$  paarweise Orthogonalität für alle  $i = 0, \dots, n - 1$

## Normierung der Vektoren

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{u}_i}{\sqrt{\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i}}$$

damit folgt für die Lanczos-Rekursionsbeziehung:

$$a_i = \frac{\mathbf{u}_i^T H \mathbf{u}_i}{\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i} = \mathbf{v}_i^T H \mathbf{v}_i$$

$$b_i = \mathbf{v}_i^T H \mathbf{v}_{i-1}$$

$$\Rightarrow \mathbf{v}_i^T H \mathbf{v}_j = 0 \text{ für } i \neq j \text{ und } i \neq j \pm 1$$

$$\Rightarrow T_{ij} = \mathbf{v}_i^T H \mathbf{v}_j \text{ ist die schon genannte Tridimensionale Matrix}$$



# Lanczos-Basis

$K_n$  ist ein invarianter Unterraum:  $HK_n \subset K_n$

in  $K_n$  gilt:  $H = \sum_{ij} \mathbf{v}_i T_{ij} \mathbf{v}_j^T$

und mit der Definition  $V = (\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_{n-1})$  ( $M \times n$ -Matrix,  $M$ : Dimension von  $H$ )

ist  $H = VTV^T$

wobei gilt:  $VTV^T = \mathbf{1} \neq VV^T$ ,  $\mathbf{v}_i$  ist die  $i$ -te Spalte von  $\mathbf{V}$

Nun definiert man die Lanczos-Basis  $\{\mathbf{q}_0, \dots, \mathbf{q}_{n-1}\}$  durch

$$T\mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$$

$$\text{also ist } T = \sum_i \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T$$

$$\text{also: } H = V \left( \sum_i \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T \right) V^T = \sum_i \lambda_i V \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T V^T$$

$$\text{also: } H = \sum_i \lambda_i \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T \text{ und } H\mathbf{x}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i \text{ mit } \mathbf{x}_i = V\mathbf{q}_i$$

# Lanczos Vor- und Nachteile

Vorteile der Lanczos-Methode:

- Die Näherung des extremen Eigenwerts ist meistens schon nach einer kleinen Iterationszahl sehr genau (typisch 100 Iterationen) !!!
- $\dim_{Lanczosmatrix} \ll \dim_{Hilbertraum}$
- Sehr speicher-effizient: Nur Speicherung von drei Vektoren notwendig:  $\mathbf{u}_{j-1}$ ,  $\mathbf{u}_j$ , und  $\mathbf{u}_{j+1}$
- Mehrdimensionale Probleme können gelöst werden

Aber es gibt auch große Nachteile:

- Konvergenz zu höheren Zuständen kann unregelmäßig sein
- $\exists$  'ghost-'Eigenwerte : Verlust an Orthogonalität der Lanczos-Vektoren aufgrund der finiten Rechnerpräzision

## Lösung des Orthogonalitätsverlustes

- Reorthogonalisierung der Lanczos-Vektoren zueinander mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens (allerdings müssen dann alle Vektoren gespeichert werden)
- teilweise Reorthogonalisierung (Cullum und Willoughby)
- Modifizierte Lanczos-Verfahren (z.B. Stopp nach Berechnung von zwei Vektoren, Diagonalisierung der  $2 \times 2$ -Matrix, resultierender Eigenwert = neuer Startpunkt für neue Iteration)
- andere Methoden wie z.B. implicitly restarted Lanczos method oder die Band- oder Block-Lanczos Methode

# Anwendung der Lanczos-Methode

## **16.447 TFlops and 159-Billion-dimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator**

- Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida -
- Japan Atomic Energy Research Institute, The University of Electro-Communications -
- Computer Society 2005 -

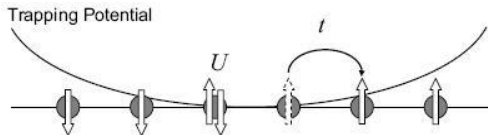
Goal: study a possibility of superfluidity in trapped atomic Fermi gases loaded on optical lattices, by implementation of an exact diagonalization code for the trapped Hubbard model on the Earth Simulator

result: succes in solving a 159-billion-dimensional matrix by using the conventional Lanczos method. world-record !

## Anwendung der Lanczos-Methode

Hubbard model with a trap potential:

$$H = -t \sum_{j,m,\sigma} (c_{j,\sigma}^+ c_{m,\sigma} + c_{m,\sigma}^+ c_{j,\sigma}) + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} + \left(\frac{2}{N}\right)^2 V \sum_{j,\sigma} n_{j,\sigma} \left(i - \frac{N}{2}\right)^2$$



Berechnung des kleinsten Eigenwerts und des dazugehörigen Eigenvektors für  $H\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$  mit der Lanczos- und der preconditioned conjugate gradient (PCG) Methode

# Anwendung der Lanczos-Methode

Vergleich der beiden Methoden für ein System mit 12 Fermionen auf 20 Plätze (10 nodes of the Earth Simulator = 80 processor elements)

Table 1: A performance test of two algorithms on 10 nodes of the Earth Simulator for a problem of 12 fermions on 20 sites.

	Lanczos	PCG
Memory Requirement [Byte]	6N 67.2G	9N 100.7G
Iteration Controllability	Fixed	Variable
# Iterations	200	91
Residual Error	8.3523E-9	1.255E-9
Elapsed Time [sec]	95.0	28.2
Flops (Peak Ratio)	269.5G (42.1%)	391.4G (61.1%)

Die PCG-Methode ist wesentlich besser außer für die Speichergröße  
Für die meisten Simulationen wird PCG benutzt und nur für sehr große Systeme Lanczos

Table 3: The dimension of Hamiltonian matrix  $H$ , the number of nodes, and memory requirements from Model 1 to 4. In the PCG method, Model 4 requires 10.7 TB, which is beyond the memory size of 512 nodes of the Earth Simulator.

Model	No. of Sites	No. of Fermions		Dimension of $H$	No. of Nodes	Memory (TB)	
		$\uparrow$ -spin	$\downarrow$ -spin			Lanczos	PCG
1	24	6	6	18,116,083,216	128	0.8	1.3
2	21	8	8	41,408,180,100	256	1.9	2.9
3	22	8	8	102,252,852,900	512	4.6	6.9
4	22	9	8	159,059,993,400	512	7.1	(10.7)

Table 4: Performances of the Lanczos method and the PCG method with the TA method on the Earth Simulator.

a) The number of iterations, residual error, and elapsed time.

Model	Lanczos Method				PCG Method			
	Itr.	Residual Error	Elapsed Time(sec)		itr.	Residual Error	Elapsed Time(sec)	
			Total	Solver			Total	Solver
1	200	$1.1 \times 10^{-7}$	106.905	101.666	105	$1.4 \times 10^{-9}$	39.325	34.285
2	200	$7.7 \times 10^{-7}$	154.159	148.453	107	$2.3 \times 10^{-9}$	55.888	48.669
3	300	$3.6 \times 10^{-11}$	288.270	279.775	109	$2.4 \times 10^{-9}$	66.819	59.510
4	300	$4.2 \times 10^{-8}$	362.635	352.944	---			

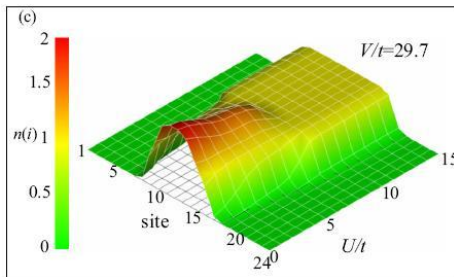
itr. ... the number of iterations

b) Flops rate.

Model	TFlops (Peak Ratio)			
	Lanczos Method		PCG Method	
	Total	Solver	Total	Solver
1	3.062(37.4%)	3.208(39.2%)	4.045(49.4%)	4.607(56.2%)
2	5.245(32.0%)	5.426(33.1%)	6.928(42.3%)	7.893(48.2%)
3	10.613(32.3%)	10.906(33.3%)	14.763(45.1%)	16.447(50.2%)
4	13.363(40.8%)	13.694(41.8%)	-	-

## Anwendung der Lanczos-Methode - Ergebnisse

Diagonalization of the Hubbard Hamiltonian  $H$  including the trapping potential and calculation of an binding energy, which is a probe for superfluidity, with varying the repulsive  $U(> 0)$  and  $V$ .  
Result: Find of a condition in which Cooper pair (superfluid) function develops based on the binding energy





## Anwendung der Lanczos-Methode - Ergebnisse

The flat region is called Mott core below.

Expectation: a superfluid phase emerges when the Mott core is formed as seen in the Figure.

Confirmation: scenario about the superfluidity by performing the exact diagonalization (Lanczos) on the repulsive Hubbard model with the trapping potential (fix the trapping strength, i.e.,  $V/t = 29.7$  and examine how the binding energy of two Fermions  $E_b$  [10] changes with varying  $U/t$ )

A negative  $E_b$  is a probe for superfluidity

Result:  $E_b$  goes to negative in a large  $U/t$  region and the amplitude of the negative  $E_b$  slightly increases with increasing  $NF$  up to  $NF = 10$  ( negative  $E_b$  emerges only above a certain  $V$ )

# Cornelius Lanczos

\* 2. Februar 1893 in Székesfehérvár, Österreich-Ungarn, 25. Juni 1974 in Budapest

ungarischer Mathematiker und Physiker

1921 Ph.D. thesis über Relativitätstheorie

1928/29 Assistent von Albert Einstein

Nach 1949 in Los Angeles im US National Bureau of Standards:

Entwicklung einiger wichtigen Techniken für mathematische Rechnungen mit Hilfe von Computern

1950 und 1952 Veröffentlichung zweier Artikel über ein von ihm

Verfahren der minimierten Iterierten genanntes Verfahren zur

Lösung von Fredholmschen Integralgleichungen, linearen

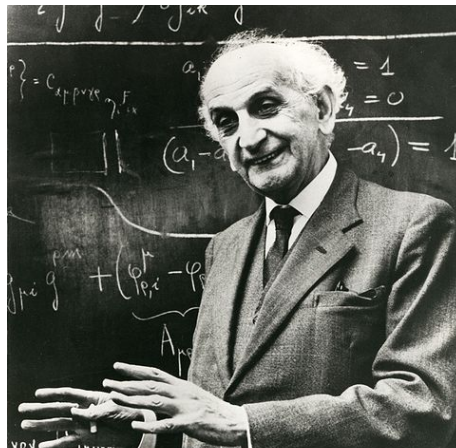
Gleichungssystemen und Eigenwertaufgaben heraus - Basis der

Lanczos-Verfahren (ersten der heutzutage noch verwendeten

Krylow-Unterraum-Verfahren)

# Cornelius Lanczos

- Vielen Dank!
- Fragen?
- Diskussion!



# Lanczos Algorithmus

Algorithmus für die Herstellung der Tridiagonalen Matrix

Vorraussetzung:  $\exists$  eine Funktion zur Berechnung des  
Skalarproduktes  $(x,y)$  und der Multiplikation  $A_{n \times n}v$

Wähle zu der zu diagonalisierenden Matrix  $A_{n \times n}$  einen beliebigen  
Vektor  $v$  der gleichen Dimension

$$v = \frac{v}{\|v\|}; q(1:n) = 0; \beta_0 = 0$$

for  $(i, 1, m)$

$$w_i = Av_i - \beta_i v_{i-1}$$

$$\alpha_i = (w_i, v_i)$$

$$w_i = w_i - \alpha_i v_i$$

$$\beta_{i+1} = \|w_i\|$$

$$v_{i+1} = \frac{w_i}{\beta_{i+1}}$$

return