

## Fortsetzung Lösungsverfahren, Arnoldiverfahren

Problem schlechte Konvergenz Arnoldi

⇒ Neustart

Idee: Berechne die Arnoldi in Schritt Faktorisierung mit immer besser initialen Vektoren!

Ausführung: Wir verwenden die Ritzvektoren als dominante Eigenvektoren!

↗ ↘ Subdominante Anteil

Wichtig: Um nicht nur einen Eigenvektor zu bekommen müssen die schon gut approximierten EV gelockert werden!  
(werden nicht mehr modifiziert!)

$$V_m = \left[ \underbrace{V_{1:l_0}^{(0)}}_{\substack{\text{schon konvergiert} \\ \text{Eigenvektoren}}} \mid \underbrace{V_{k+1:m}^{(n)}}_{\substack{\text{aktive} \\ \text{Vektoren um} \\ \text{diese werden} \\ \text{aktualisiert}}} \right]$$

↑ ↗  
Aber Orthogonalisierung erfolgt bzgl. beide Vektoren.

### Arnoldi mit Deflation

Matrix  $A$ , Anzahl der Schritte  $m$ ,  $V_{1:k}$ ,  $l_{k+1}$  mit  $k$  und  $V_{k+1}$  mit  $M_{k+1}$

For  $j = k+1, \dots, m-1$

$$w = Av_j$$

Orthogonalisierung von  $w$  bzgl.  $V_j$  (ergibt  $h_{1:j,j}$ )

$$h_{j+1,j} = \|w\|_2$$

falls  $h_{j+1,j} = 0$  stoppe

$$V_{j+1} = w / h_{j+1,j}$$

end

$$f = A v_m$$

$f$  ist bzgl.  $v_m$  orthogonal (ergibt  $k=0, m$ )  
 $\beta = \|f\|_2$

(Explizit neustartende Arnoldi)

Eingangs Matrix  $A$ , initialer Vektor  $v_1$

Dimension des Unterraums  $m$

Normalisieren  $v_1$

Setze  $V_m = [v_k], k=0$

Restart Schritte

$m-k$  Schritte Arnoldi:  $k$  Blöcke

Reduzieren  $H_m$  auf (quasi) Dreieckform  $H_m \leftarrow V_1^x H_m V_1$  (z.B. QR)

Bei Entartung  $\rightarrow$  weitere  $1 \times 1$  oder  $2 \times 2$  diagonale Blöcke:  $H_m \leftarrow U_2^x H_m U_2$

$U = U_1 U_2$

Bestimme Eigenvektoren von  $H_m$ ,  $H_m y_i = \lambda_i y_i$

Berechne residuum  $\tau_i = \beta |e_k^x y_i|$

Locke konvergente Eigenvektoren

$V_m \leftarrow V_m U$

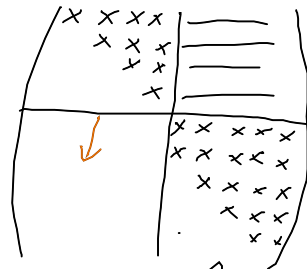
end

Wir sehen das Verfahren wird sehr kompliziert

Algorithmus  
 strukturiert von

$H_m =$

Solange ausgefüllt  
 bis spärlich  
 Eigenvektoren vertauscht  
 sind



Hessenbergform

$\Rightarrow$  Wichtiges Verfahren Krylov-Selver (konvergiert superschnell!!)  
 Verfahren, ähnlich wie Arnoldi.

Grundidee: Dieser Verfahren kann für große Matrizen  
kleine Unterein, die Eigenvektoren und -werte  
gut approximieren!

⇒ Wichtiges Resultat, Forschungsfeld für sich, behaupten  
fertige Solver für eigene wissenschaftliche Projekte!

## II.6) Preconditionierung von Matrizen

Problem bei iterativen Verfahren.

Die Konvergenz kann sehr langsam sein.

Meist hängt die Konvergenz von der Konditionszahl ab:

$$\kappa(A) = \frac{|\lambda_{\max}(A)|}{|\lambda_{\min}(A)|} \quad \left\{ \begin{array}{l} \leftarrow \text{größte Eigenwert} \\ \leftarrow \text{kleinste Eigenwert} \end{array} \right.$$

Falls  $\kappa(A) \gg 1$ , schlecht konditioniertes Problem,  
sonst gut konditioniert. (Kontext Spiel system)

Problem schlecht konditioniertes System konvergieren schnell  
(Man kann sich vorstellen falls

↗  $A$  ↘ hohe numerische Ungenauigkeit.

⇒ Lösung Preconditioning (Verkonditionieren), geschieht jeweils  
Problem stabilisiert und verändert Spalten.

Idee: z.B. Spiel system

$$\underline{A} \cdot \underline{x} = \underline{b} \quad \text{mit einer regulären Matrix } M \quad \underline{M} \cdot \underline{A} \cdot \underline{x} = \underline{M} \cdot \underline{b}$$

invertiert

werden, bzw.  $\underline{A} \cdot \underline{M} \cdot \underline{y} = \underline{b}$  mit  $\underline{y} = \underline{M}^{-1} \cdot \underline{x}$  solved wird.

Dabei wird eine Matrix konstruiert, deren Inverses sich leicht für den wichtigsten Teil approximieren lässt (verschiedene Faktorisierung, unvollständig, Gaußverfahren)

=> Approximate LSS des Problem um schnelle Konvergenz zu bekommen.

### Beispiel

#### Jacobi Preconditioning

Falls die Diagonale dominant ist (z.B. bei part DGL)

$$M = \text{diag}(A) \quad \text{und} \quad M_{ij}^{-1} = \frac{\delta_{ij}}{A_{ij}} \quad (A_{ij} \neq 0)$$

• Unvollständige Cholesky Faktorisierung

• Unvollständige LU Faktorisierung... (Teile der Matrix solved)

=> Wenn Konvergenz zu langsam mit der Beschäftigung.

### III. Quantenchemie

#### III.7 Basisssysteme

(Literatur: F. Jensen, Introduction to computational Chemistry, Wiley)

Sehen wir ein Schritt weiter bzgl. der Formulierung der Schrödingergleichung.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

die Berechnung von Eigenwerten von Molekülen.

Viel einfacher funktioniert über die Berechnung der Energie

Erste Zugs Berechnung der Grundzustandsenergie:

erste Idee Schrödingergleichung diskretisierung im Raum

$$\psi(x_1, x_2, x_3, \dots)$$

↑ Elektron 1    ↑ Elektron 2    ↑ Elektron 3

Schlechte Idee nur für schwere Teilchen machbar.

vielleicht  $H, H^+, He, H_2^+$  aber nicht mehr (auch keine Macht!)

=> Geeignete approximierende Basis für die Einzeile Wellenfunktion (z.B. in Slater determinanten)

$$\psi(\underline{r}) = \sum_i c_i \chi_i(\underline{r}) \quad (\text{für das Orbital } \Rightarrow \text{Vieltermer später})$$

? wieviele Funktionen!

Bestimmung des Grundzustats z.B. über Ritzprinzip: wasser

$$\langle H \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad \text{für beliebigen Zustand } |\psi\rangle$$

d.h. wenn wir  $\langle \psi |$  variieren, so ist das Minimum eine obere Schranke für den tatsächlichen Grundzustand.

Die Basis system kann z.B. für Berechnung eines solchen Grundzustands verwendet werden.

### Wichtige Punkte für Basis system

• Dazwischen von Erwartungswert

z.B.  $\int \psi^*(\underline{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}) d\underline{r}$  für Energie

oder  $\iint \frac{\psi_1^*(\underline{r}) \psi_2^*(\underline{r}') \psi_2(\underline{r}') \psi_1(\underline{r})}{|\underline{r} - \underline{r}'|} d\underline{r} d\underline{r}'$  Hartree-Tam  
Beispiels

oder  $\iint \frac{\psi_1^*(\underline{r}) \psi_2^*(\underline{r}') \psi_2(\underline{r}) \psi_1(\underline{r}')}{|\underline{r} - \underline{r}'|} d\underline{r} d\underline{r}'$  Austausch oder  
Fock-Tam  
Beispiels

muss skaliert sein

• Möglichst akkurat Beschreibung der Wellenfunktion, aber größtmögliche Ausdehnung

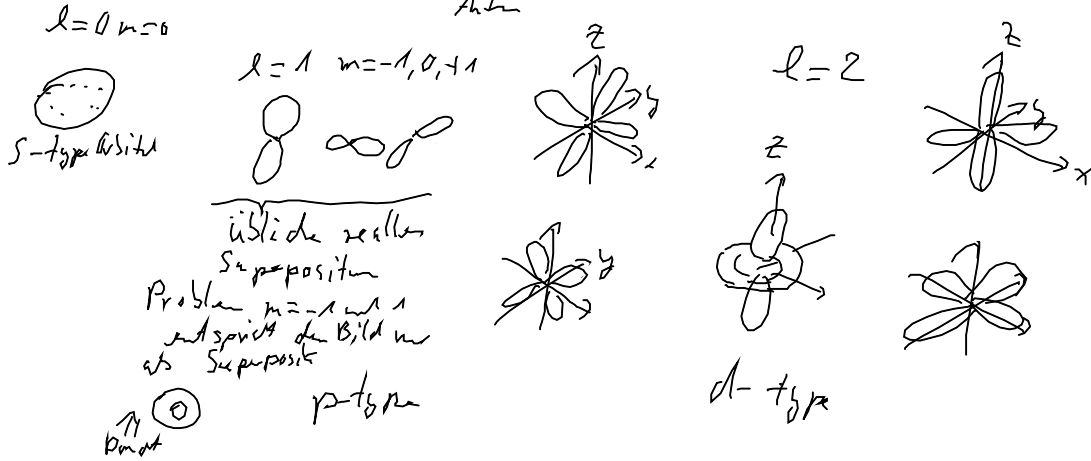
Slater v.s. Gaußwellenfunktion Orbitale ← Basis sprach

Slater Type Orbitale (STO)

- für

$$\chi_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) = N Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) r^{l-1} e^{-r/a_0}$$

Winkelanteil  $\rightarrow$  Polynom in radial Abh.  $\rightarrow$  Typische Zerfallsfaktoren wie bei H-Atom



Vorteil = - Exponentialfunktion führt zu schneller Konvergenz  
- keine radiale Knoten (bei Kombination notwendig)

Nachteil: Drei - 4 Lagen (also mehrere Atome involviert)  
Coulombintegral können nicht analytisch berechnet werden.  
(Analytische Form ist Geschwindigkeitsvorteil)

Hauptanwend.: 1 Atomiges System oder 2 Atomiges System,  
wo diese Integral nicht vorkommen (oder DF7 Anwendung,  
wo das nicht in Austausch-Funktion vorkommt)....