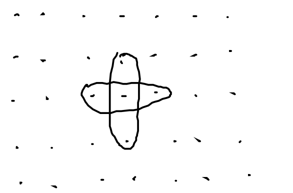
Fortsetzung Finite Differenzen zur Lsg. der Schrödingergl.

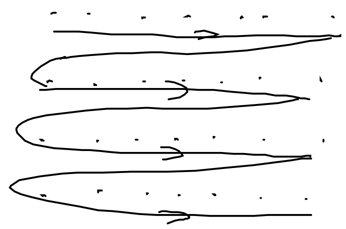
Gitter



Bei naiver Betrachtung

Naive Berechnung des Vektorindex
$i[n_1, n_2] = n_1 + n_2 M$
Indizierung / Anordnung in Vektor/Speicher

Problem
Abstand
im Speicher

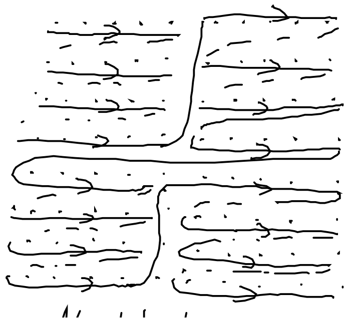


Beispiel 3x3 Grid

$$
\begin{array}{c|ccccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\
\hline
1 & -4 & 1 & & 1 & & & & & \\
2 & 1 & -4 & 1 & & 1 & & & & \\
3 & & 1 & -4 & & & 1 & & & \\
4 & 1 & & & -4 & 1 & & 1 & & \\
5 & & 1 & & 1 & -4 & 1 & & 1 & \\
6 & & & 1 & & 1 & -4 & & & 1 \\
7 & & & & 1 & & & -4 & 1 & \\
8 & & & & & 1 & & 1 & -4 & 1 \\
9 & & & & & & 1 & & 1 & -4
\end{array}
$$

Weit entfernte offdiagonale Einträge, weit entfernt in Speicher nicht in Cache.
Großer Transfer bei MPI

Lösung andere Indizierung (Blöcke)



Vorteil: Die meisten Zugriffe erfolgen auf Vektorpositionen, die sehr nah beieinander sind. Weniger Zugriffe weit weg im Speicher oder auf anderen Rechnern!

<u>Nachteil</u>: Programm aufwendiger (insbesondere der Matrixaufbau)
Funktion $i[n_1, n_2]$, Indizierung generell schwierig.

$\Rightarrow$ Unbedingt Grid anders strukturieren.

Wichtig: Verteilung auf verschiedene CPUs oder Rechner (MPI) entlang der Blockgrenzen, sonst wird der Vorteil nicht ausgespielt.

Es fehlt der Term beim Trion

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_{r_1}\cdot\nabla_{r_2}$$ <u>Vorgehen</u>:

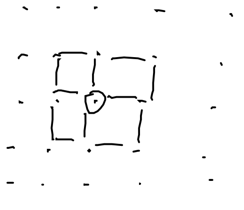
$$\nabla_{r_1}\cdot\nabla_{r_2} = \partial_{x_1}\partial_{x_2} + \partial_{y_1}\partial_{y_2}$$

$$\partial_{x_2}\partial_{x_1}\Psi(x_1[n_1], y_1[n_2], x_2[n_3], y_2[n_4])$$

$$\approx \partial_{x_2}\sum_{\nu=0}^{n} \delta^1_{n\nu_1}\,\Psi(x_1[n_1+\nu_1-\tfrac{n}{2}], y_1[n_2], x_2[n_3], y_2[n_4])$$

$$\approx \sum_{\nu_1=0}^{n}\sum_{\nu_2=0}^{n} \delta^1_{n,\nu_1}\,\delta^1_{n,\nu_2}\,\Psi(x_1[n_1+\nu_1-\tfrac{n}{2}], y_1[n_2], x_2[n_3+\nu_2-\tfrac{n}{2}], y_2[n_4])$$

Form des Stencils



Damit ist alles geklärt, wir können für Exziton und Trion H als Matrix schreiben.

$$\underline{\underline{H}}\cdot\underline{v} = \underline{E}\,\underline{v}$$

Matrix Differentialoperator....

Vektor, der Wellenfunktion Ψ.

II.5 Iterative Lösungsverfahren für das Eigenwertproblem

Ziel dieses Abschnitts Grundlagen für iterative Lösungsverfahren für

$$\underline{\underline{H}}\cdot\underline{v} = \underline{E}\,\underline{v}$$

wobei H z.B. aus einer partiellen DGL kommt.
Wir geben einen groben Überblick über wichtige Methoden
(unvollständig, soll vor allem die Komplexität zeigen).

Literatur: z.B. Technical Reports zu Slepc
http://slepc.upv.es

QR-Faktorisierung und Gram-Schmidt-Verfahren

$$\underline{\underline{X}} = \underbrace{\underline{\underline{Q}}}_{\text{in Spalten orthogonale Matrix}} \cdot \underbrace{\underline{\underline{R}}}_{\text{obere Dreiecksmatrix}} \qquad \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

Dreiecksmatrizen haben verschiedene Vorteile:

Determinante ist das Produkt der Diagonaleinträge:

$\Rightarrow$ Wenn $\det(\underline{\underline{R}} - \underset{\uparrow \text{Eigenwert}}{\lambda} \mathrm{Id}) = 0$, Eigenwerte stehen auf der Diagonale.

Doch wie bestimmt man $\underline{\underline{Q}}$ und $\underline{\underline{R}}$ numerisch

- Householder Reflektionen
- Givens Drehungen
- Gram-Schmidt (in der einfachsten Form numerisch instabil)

Hier Diskussion Gram-Schmidt Verfahren, Modifikation für bessere numerische Stabilität!

Zur Erinnerung, wie funktioniert Gram-Schmidt?

Wir haben N Vektoren $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$, diese wollen wir orthogonalisieren!

Wie erhalten wir die orthogonalen Vektoren $q_1, \dots, q_n$ mit ihrer Norm $r_{jj} = \|q_j\|_2$ mit

$$q_j = \underline{x}_j - \underbrace{\sum_{i=1}^{j-1} \underbrace{\underline{q}_i^T \cdot \underline{x}_j}_{r_{ij}} \, q_i}_{\text{Anteil von } x_j \text{ in Richtung von span}\{q_1, \dots, q_{j-1}\}}$$

Im Form eines Algorithmus (Gram-Schmidt Algorithmus od. StepRepeat)

$q_j = \underline{x}_j \qquad q_1 = q_1 = x_1$

for $i = 1, \dots, j-1$

$\quad r_{ij} = q_i^T \cdot \underline{x}_j$

$\quad q_j = q_j - r_{ij} q_i$

end

$r_{jj} = \|q_j\|^2$

Man kann das in Matrix Form schreiben

$$q_j = \Big(\mathrm{Id} - \underbrace{\underbrace{Q_{j-1} \, Q_{j-1}^T}_{\substack{\text{Matrix mit den } j-1 \\ \text{Spalten mit } q_i \\ \text{Projektor des Raums}}}}_{\text{orthogonaler Projektor}}\Big) q_j$$

$\Rightarrow$ was hat das mit QR Faktorisierung zu tun.

Algorithmus

Eingang Matrix X

$r_{11} = \|x_1\|_2$

$q_1 = x_1 / r_{11}$

for $j = 2, \dots, n$

Erhalte die Vektoren $[q_j, r_j]$ aus dem Gram Schmidt Verfahren für $q_1 \dots q_{j-1}$ und $\underline{x}_j$

$q_j = q_j / r_{jj}$

enn

Angabe die Matrix Q und R

Warum ist das die QR Faktorisierung? Wegen $i \geq j$ ist Dreiecksmatrix

$$(\underline{q}_1, \ldots \underline{q}_n) \begin{pmatrix} \|q_1\|^2 & \underline{q}_1^T \cdot \underline{x}_2 & \underline{q}_1^T \cdot \underline{x}_3 \ldots & \underline{q}_1^T \cdot x_n \\ & \|q_2\|^2 & q_1^T \cdot x_3 & \ldots \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \|q_n\|^2 \end{pmatrix} =$$

$\underline{q}_n \underline{q}_n^T$ ist ein Projektor auf den entsprechenden Unterraum

$\underline{x}_2$ ist in span$\{\underline{q}_1\}$

$\underline{x}_3$ ist in span$(\underline{q}_1, \underline{q}_2)$ ....

$\underline{x}_j$ ist in span$(\underline{q}_1 \cdots \underline{q}_{j-1})$

$$\Rightarrow (\underline{x}_1, \underline{x}_2, \ldots \underline{x}_n) = \underline{\underline{X}}$$

$\Rightarrow$ Unsere Vektoren $\underline{x}_i$ sind die Spaltenvektoren von $\underline{\underline{X}}$, wir haben damit ein Verfahren um die $\underline{\underline{Q}}$-$\underline{\underline{R}}$ Darstellung zu gewinnen

(Diese ist eindeutig, wenn bestimmte Vorzeichen vorgeschrieben werden)

Funktioniert das in der Praxis gut?

Problem, falls

$\underline{x}_i$ $\underline{x}_j$ sehr nahe beieinander sind

$\Rightarrow$ Numerische Ungenauigkeit.

$\Rightarrow$ Führt unter Umständen zu falschen Eigenpaaren.

Alternative andere Verfahren oder Modifikation vom Gram-Schmidt Verfahren: Gram-Schmidt im Prinzip.

$(Id - Q_{j-1} Q_{j-1}^T) x_j$ Projektion auf die orthogonale Komplement.

Man kann also auch jede Dimension einzeln herausprojizieren:

$(Id - q_{j-1} q_{j-1}^T) \dots (Id - q_1 q_1^T) x_j$

Modifizierter Gram-Schmidt

$q_j = \underline{x}_j$
for $i = 1, \dots, j-1$
$r_{ij} = q_i^T \cdot q_j$
$q_j = q_j - r_{ij} q_i$
end
$r_{jj} = \|q_j\|_2$

Dies ist etwas stabiler, nur linear in der Konditionszahl.

$\Rightarrow$ (Immer noch instabil) Lösung ist ein Kriterium zur Reorthogonalisierung. (Details siehe Slepc Technical Report)

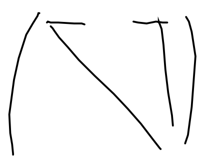
Wozu ist QR Zerlegung gut?

Gleichungssystem:

$$\underline{\underline{X}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$$

$\Rightarrow$ $\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{R}}$ Zerlegung von $\underline{\underline{X}}$: $\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} = \underline{b} \Leftrightarrow \underline{\underline{Q}}^+ \cdot \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} = \underline{\underline{Q}}^+ \cdot \underline{b}$

$$\Leftrightarrow \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} = \underbrace{\underline{\underline{Q}}^+ \cdot \underline{b}}_{\underline{a}} = \underline{a}$$

$\underline{\underline{R}} \rightarrow$ 

schnelle Lösung:

$a_N = r_N \cdot x_N$

$a_{N-1} = r_{N N-1} x_N + r_{N-1 N-1} x_{N-1}$

(Skaliert n^3)