

UN METODO DE INVERSION DE MATRICES COMPLEJAS TRIDIAGONALES POR BLOQUES QUASI - HERMITICAS

E.M.Godfrin.

*Departamento Fuentes Renovables y Uso Racional de la Energía,
Comisión Nacional de Energía Atómica, Av.del Libertador 8250, 1429 Buenos Aires.*

En el presente trabajo se desarrolló un método para invertir matrices complejas, tridiagonales por bloques quasi-hermíticas usando particiones adecuadas de la matriz completa. Este tipo de matriz es de uso frecuente en mecánica cuántica y, más específicamente, en física del estado sólido (por ejemplo, en interfases y en super-redes) cuando se utiliza la aproximación de ligadura fuerte. Se analizó la eficiencia del método comparando los tiempos de CPU y la cantidad de memoria auxiliar requeridos por éste con diferentes rutinas científicas.

INTRODUCCION

Una de las técnicas más utilizadas en la mecánica cuántica para el estudio de propiedades relacionadas con excitaciones elementales (electrones, fonones, etc.) es el método de combinación lineal de orbitales atómicos y, dentro de éste, la aproximación de ligadura fuerte [1,2] ('tight-binding'). La aplicación de esta última al análisis de moléculas y sólidos da lugar a la formulación de operadores Hamiltonianos que, escritos en forma matricial en una base determinada, poseen numerosos elementos nulos. En casos particulares de sistemas periódicos (o sea, con simetría traslacional), tales como sólidos cristalinos y super-redes, dicho Hamiltoniano H resulta estar representado por una matriz compleja, de dimensión grande (por ejemplo, hasta 100×100), quasi-hermítica¹, y tridiagonal por bloques (ver, por ejemplo, [3]). El cálculo de la densidad de estados en función de la energía se reduce a calcular la traza de la matriz de Green G [1,2] definida por:

$$G = (EI - H)^{-1}$$

donde E es un escalar e I , la matriz identidad. La utilización de técnicas convencionales de cálculo numérico para la resolución de esta ecuación resulta ineficiente desde el punto de vista de tiempo de cálculo y, en muchos casos, hasta inaplicable debido a los requerimientos de memoria de computadora, ya que estas técnicas no tienen en cuenta la estructura particular y los numerosos elementos nulos de H .

¹ $M_{ij} \in \mathbb{C}^{p \times q}$, $M_{ij} = M_{ji}^*$ si $i \neq j$ y $\det M_{ii} = 0$ donde M^* indica la matriz traspuesta y conjugada de M .

Por lo expuesto anteriormente, se desarrolló una técnica de cálculo para obtener la inversa de matrices de gran tamaño, quasi-hermíticas y tridiagonales por bloques, teniendo en cuenta el tamaño reducido de los bloques (típicamente de 5×5 ó 10×10) y basadas en la realización de particiones apropiadas de la matriz completa, almacenándose únicamente los elementos significativos. Cabe mencionar que una primera versión de este método (que sólo calcula los bloques diagonales de la matriz inversa) ha sido usada en varios casos para estudiar las propiedades electrónicas de interfases de semiconductores (ver, por ejemplo, [4,5]).

PLANTEO DEL PROBLEMA MATEMATICO

Sea M la matriz tridiagonal compuesta por n bloques, descripta de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{21}^* & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{32}^* & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots & \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & M_{n,n-1} & M_{n,n} \end{pmatrix}$$

el problema consiste en hallar la matriz G tal que $MG=I$, siendo I la matriz identidad.

Particionando la matriz G en forma análoga a la de M se tiene, entonces:

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ G_{n1} & G_{n2} & \dots & G_{nn} \end{pmatrix};$$

la ecuación $MG = I$ puede escribirse en forma de

sistema de ecuaciones matriciales cuya resolución permite obtener las matrices G y, por lo tanto, la matriz inversa de M .

RESOLUCION DEL PROBLEMA

Dado que la resolución del problema general, considerando que la matriz M está formada por n bloques, resulta muy tediosa y no aporta mayor claridad, se resolverá el problema para el caso de 4 bloques.

Sean, entonces, M y A tales que

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{21}^+ & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{32}^+ & 0 \\ 0 & M_{32} & M_{33} & M_{43}^+ \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix}$$

Resolviendo los dos primeros sistemas, cuyas variables son G_{i1} y G_{i2} respectivamente, para $1 \leq i \leq 4$, y definiendo

$$\begin{aligned} X_4 &= 0 \\ X_3 &= M_{43}^+ [M_{44} - X_4]^{-1} M_{43} \\ X_2 &= M_{32}^+ [M_{33} - X_3]^{-1} M_{32} \\ X_1 &= M_{21}^+ [M_{22} - X_2]^{-1} M_{21} \\ Y_1 &= 0 \\ Y_2 &= M_{21} [M_{11} - Y_1]^{-1} M_{21}^+ \\ Y_3 &= M_{32} [M_{22} - Y_2]^{-1} M_{32}^+ \\ Y_4 &= M_{43} [M_{33} - Y_3]^{-1} M_{43}^+ \end{aligned}$$

se obtienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} G_{41} &= -[M_{44} - X_4]^{-1} M_{43} G_{31} \\ G_{31} &= -[M_{33} - X_3]^{-1} M_{32} G_{21} \\ G_{21} &= -[M_{22} - X_2]^{-1} M_{21} G_{11} \\ G_{11} &= [M_{11} - X_1 - Y_1]^{-1} \\ G_{42} &= -[M_{44} - X_4]^{-1} M_{43} G_{32} \\ G_{32} &= -[M_{33} - X_3]^{-1} M_{32} G_{22} \\ G_{22} &= [M_{22} - X_2 - Y_2]^{-1} \\ G_{12} &= -[M_{11} - Y_1]^{-1} M_{21}^+ G_{22} \end{aligned}$$

Análogamente, se obtienen G_{i3} and G_{i4} (para $1 \leq i \leq 4$). La regla general para una matriz de n bloques se deduce inmediatamente:

$$\begin{aligned} G_{ii} &= [M_{ii} - X_i - Y_i]^{-1} \\ G_{ii} &= C_i - G_{i-1,j} \quad \text{para } i > j \\ G_{ij} &= D_i - G_{i+1,j} \quad \text{para } i < j \end{aligned}$$

para $1 \leq i, j \leq n$, donde

$$\begin{aligned} X_n &= 0 \\ X_{n-i} &= M_{n-i+1,n-i}^+ [M_{n-i+1,n-i+1} - X_{n-i+1}]^{-1} M_{n-i+1,n-i} \quad \text{para } 1 \leq i \leq n-1 \\ Y_1 &= 0 \\ Y_{i+1} &= M_{i+1,i} [M_{ii} - Y_i]^{-1} M_{i+1,i}^+ \quad \text{para } 2 \leq i \leq n \\ C_i &= -[M_{ii} - X_i]^{-1} M_{i,i-1} \quad \text{para } 1 \leq i \leq n-1 \\ D_i &= -[M_{ii} - Y_i]^{-1} M_{i+1,i}^+ \quad \text{para } 2 \leq i \leq n \end{aligned}$$

EVALUACION DEL METODO

La programación del método se ha efectuado en lenguaje FORTRAN, en forma de rutina autoconsistente, usando el almacenamiento por bandas para la matriz M (sólo se almacenan los bloques diagonales e infradiagonales); la cantidad de memoria auxiliar² es menor o igual a $2 \times M D I M^2 \times (3 + NB)$, donde $M D I M$ es la dimensión máxima de los bloques y NB es la cantidad de bloques de la matriz M .

Cabe notar que el programa ha sido desarrollado para el caso en que las matrices diagonales no son hermíticas, siendo necesario almacenar las matrices M_{ii} y $M_{i+1,i}$ en su totalidad, así como la matriz G ; si M_{ii} son hermíticas, su inversa y las matrices X_i y Y_i también lo son, luego, podrá usarse la forma triangular de almacenamiento de dichas matrices (por ejemplo, las diagonales y las infradiagonales).

Para una mejor evaluación de este método, se ha hecho una búsqueda de rutinas de las bibliotecas IMSL y HARWELL que cumplieran funciones similares a las de este algoritmo. Las únicas rutinas que calculan la inversa de una matriz compleja halladas son LEQT2C (IMSL) y MA23A (HARWELL).

Además se usó la versión más sencilla del algoritmo de inversión de matrices (INV).

La rutina LEQT2C no permite invertir este tipo de matrices (su código de retorno indica matrices algorítmicamente no inversibles).

Los valores numéricos obtenidos mediante las rutinas INV y MA23A coinciden, al menos hasta la cuarta cifra significativa con los obtenidos mediante este método.

El tiempo de CPU insumido utilizando una computadora BASF-768 y la cantidad de memoria auxiliar requerida por los distintos algoritmos están dados en las tablas 1 y 2.

² No se incluye la cantidad de memoria necesaria para almacenar la matriz M

Dimensión de la matriz M	30	50	100
MA23A	1050	2750	10500
este método	450(a)	650(a)-1600(b)	1150(a)-2600(b)

Tabla 1: Cantidad de memoria auxiliar requerida, en unidades de longitud de número complejo (típicamente, 8 bytes en simple precisión), para tres dimensiones de matrices. Las dimensiones de los bloques son: (a) 5 x 5; (b) 10 x 10.

Dimensión de la matriz M	30	50	100
MA23A	0.54	1.88	7.70
INV	0.42	1.84	13.87
este método	0.26(a)	0.58(a)-1.25(b)	1.82(a)-3.74(b)

Tabla 2: tiempo de CPU insumido, en segundos. Las dimensiones de los bloques son: (a) 5 x 5; (b) 10 x 10

CONCLUSIONES

En vista de los resultados obtenidos y detallados en la sección anterior, este método permite un uso más racional de la memoria y de los tiempos de máquina para el caso de matrices tridiagonales por bloques, quasi-hermíticas. Este método, con las modificaciones necesarias, puede también ser usado para resolver sistemas del tipo $GM = B$, donde M es una matriz tridiagonal por bloques, especialmente si B es una matriz diagonal.

Cabe destacar que los cálculos de las matrices X e Y son independientes, así como el de los bloques infra-diagonales y supradiagonales; en consecuencia, este algoritmo también puede ser utilizado en computadoras vectoriales.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo ha sido parcialmente subvencionado por el Contrato de Cooperación Científica N° ST2J - 0254 - 7 - E (EDB) del Mercado Común Europeo y la Universidad Autónoma de Madrid (España). La autora desea expresar su más profundo agradecimiento al Prof. F.Flores por su apoyo y su estímulo durante el desarrollo del presente trabajo. También, agradece a A.Muñoz y J.C. Durán, quienes le confiaron la resolución del problema e incorporaron el método a sus programas desde 1986, y especialmente al segundo de ellos, por haber leído el manuscrito con fructífero espíritu crítico, lo cual contribuyó a clarificar su contenido.

REFERENCIAS

- [1] J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University (1963).
- [2] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt-Saunders International Editions (1981).
- [3] F.Guinea, J.Sánchez-Dehesa y F.Flores, J.Physics C 16, 6499 (1983).
- [4] A.Muñoz, J.C.Durán y F.Flores, Surface Science 181, L200 (1987).
- [5] A.Muñoz, R.Pérez, J.C.Durán y F.Flores, Surface Science 211/212, 503 (1989).

CEILAP
CITEFA CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA