

Численный метод расчета статистической суммы

Автор: Сайфутдинов А.Д. Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия.

Научный руководитель: Лобанов И.С. Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

В работе «Устойчивость магнитных состояний металлических наносистем» (автор Бессараб П.Ф., 2013г.) была изучена многомерная теория активационных магнитных переходов, обобщающая теорию переходных состояний (ТПС) на магнитные степени свободы, и выведена частота переходов из одного состояния в другое в гармоническом приближении. Данная частота зависит от отношения определителей двух матриц, которые в силу своих размеров затрудняют процесс вычисления. Этот определитель также называют статистической суммой.

Цель данной работы состоит в том, чтобы реализовать алгоритм, который позволит уменьшить время необходимое на вычисление определителя эрмитовой матрицы, добиться оптимальной точности вычислений, а также уменьшить количество памяти необходимое для вычисления определителя. Одним из ключевых элементов алгоритма является метод LOBPCG (Locally Optimal Block Preconditioned Conjugate Gradient), с его помощью находится небольшое количество собственных значений матрицы, с помощью которых будет находиться полный определитель матрицы. Данный метод удобен тем, что он является безматричным методом, что позволяет не хранить всю матрицу в памяти, а также данный метод позволяет находить наименьшие (или наибольшие) собственные значения, что упрощает численный расчет.

В данной работе были реализованы несколько вариантов алгоритма численного расчета статистической суммы с применением метода LOBPCG для нахождения части собственных значений, сравнены их быстродействие и точность вычислений.

Докладчик

Сайфутдинов А.Д.

Научный руководитель

Лобанов И.С.

Заведующий кафедрой

Попов И.Ю.