# Lanczos method

Zegang Liu

University of Science and Technology of China

September 28, 2021

# Lanczos 迭代法

Lanczos 迭代法是求解矩阵行列式的一种非常方便的方法，尤其是对于维数很大但是稀疏的矩阵，所以它在大尺度晶体的无序研究中被广泛使用。它的本质是将一个量子系统的哈密顿量映射到一个三对角矩阵中。首先，我们考虑一个哈密顿矩阵 H 和一个归一的初始态 $|f_0\rangle$，我们称其为种子态。接着，我们借助种子态的投影算符 $P_0 = |f_0\rangle\langle f_0|$，构造一个与种子态正交的态 $|F_1\rangle$:

$$|F_1\rangle = (1 - P_0)H|f_0\rangle = H|f_0\rangle - a_0|f_0\rangle, \tag{A.1}$$

其中 $a_0 = \langle f_0|H|f_0\rangle$。然后我们将 $|F_1\rangle$ 态归一化，定义新的态 $|f_1\rangle$:

$$|f_1\rangle = \frac{1}{b_1}|F_1\rangle, \tag{A.2}$$

其中 $b_1 = \sqrt{\langle F_1|F_1\rangle}$。用同样的方式，我们得到与 $|f_0\rangle$ 和 $|f_1\rangle$ 正交的态，$|F_2\rangle$:

$$\begin{aligned} |F_2\rangle =& (1 - P_1 - P_0)H|f_1\rangle \\ =& H|f_1\rangle - a_1|f_1\rangle - b_1|f_0\rangle, \end{aligned} \tag{A.3}$$

这里 $P_1 = |f_1\rangle\langle f_1|$，$a_1 = \langle f_1|H|f_1\rangle$。类似的，我们将 $|F_2\rangle$ 态归一化，定义新的态 $|f_2\rangle$:

$$|f_2\rangle = \frac{1}{b_2}|F_2\rangle, \tag{A.4}$$

# Lanczos 迭代法

其中 $b_2 = \sqrt{\langle F_2|F_2\rangle}$。重复以上步骤 n 次，我们可以得到第 $n+1$ 个正交态：

$$\boxed{|F_{n+1}\rangle = H|f_n\rangle - a_n|f_n\rangle - b_n|f_{n-1}\rangle.} \tag{A.5}$$

而对应的下一组的系数为：

$$b_{n+1} = \sqrt{\langle F_{n+1}|F_{n+1}\rangle};\ a_{n+1} = \langle f_{n+1}|H|f_{n+1}\rangle. \tag{A.6}$$

如此，我们就可以在新的基矢 $(|f_0\rangle, |f_1\rangle, |f_2\rangle, \cdots)$ 下，将哈密顿量 H 表示为一个三对角矩阵，如下：

$$H = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & b_2 & a_2 & b_3 & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \tag{A.7}$$

三对角矩阵的一个最重要的特征就是能更简便地计算矩阵的行列式。这里我们

# 求解 $G$

$G = (z - H)^{-1}$, $\langle f | G | f \rangle$ ?

- $f \to f_0$

$$z - \check{H}_c = \left(\begin{array}{c|cccccc} z - a_0 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline -b_1 & z - a_1 & -b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -b_2 & z - a_2 & -b_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -b_3 & z - a_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & z - a_{L-1} & -b_L \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -b_L & z - a_L \end{array}\right).$$

- $(z - H)^{-1}$

$$z - \check{H}_c = \begin{pmatrix} z - a_0 & {B^{(1)}}^T \\ B^{(1)} & z - \check{H}_c^{(1)} \end{pmatrix}$$

# 求解 $G$

The inversion procedure that led to Equation (1) performed matrix block operations that operated on **C** and **D** first. Instead, if **A** and **B** are operated on f
**D** and $\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}$ are nonsingular,[12] the result is

$$\begin{bmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ \mathbf{C} & \mathbf{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1} & -(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1} & \mathbf{D}^{-1}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{A}-\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C})^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\end{bmatrix}.$$

$$z-\check{H}_c=\left(\begin{array}{c|cccccc} z-a_0 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ \hline -b_1 & z-a_1 & -b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -b_2 & z-a_2 & -b_3 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & 0 & -b_3 & z-a_3 & \cdots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & z-a_{L-1} & -b_L\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -b_L & z-a_L \end{array}\right).$$

$$\left[(z-\check{H}_c)^{-1}\right]_{00}=\left(z-a_0-B^{(1)^T}(z-\check{H}_c^{(1)})^{-1}B^{(1)}\right)^{-1}=\left(z-a_0-b_1^2\left[(z-\check{H}_c^{(1)})^{-1}\right]_{00}\right)$$

# 求解 $G$

$\langle f_0|G|f_0\rangle$

$$\check{G}_c(z) = \left[(z-\check{H}_c)^{-1}\right]_{00} = \cfrac{1}{z-a_0-\cfrac{b_1^2}{z-a_1-\cfrac{b_2^2}{z-a_2-\cdots}}},$$

截断

$$z-a_n-t(z),\ \ t(z)=\frac{1}{2}((z-a_\infty)-(z-a_\infty-4b_\infty^2)) \tag{1}$$

在过去 Lanczos 方法大多是用来求局域态密度，当种子态取为只在实空间 $\mathbf{r}_i$ 处有值的矢量：

$$|f_i\rangle = \begin{pmatrix} 0_{(1)} \\ 0_{(2)} \\ \vdots \\ 1_{(i)} \\ \vdots \\ 0_{(n)} \end{pmatrix}; \tag{A.12}$$

其中右下角的 $(n)$ 表示矢量元素对应的实空间位置。此时 Lanczos 所求的格林函数对应 $i$ 位置处的局域态密度：

$$\rho_{local}(\mathbf{r}_i) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle f_i|G|f_i\rangle = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle \mathbf{r}_i|G|\mathbf{r}_i\rangle. \tag{A.13}$$

在此基础上，我们利用随机相位近似，将 Lanczos 方法应用于全局态密度的求解。我们将种子态定义为：

$$|f_r\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\begin{pmatrix} e^{i2\pi\Delta_1} \\ e^{i2\pi\Delta_2} \\ \vdots \\ e^{i2\pi\Delta_i} \\ \vdots \\ e^{i2\pi\Delta_n} \end{pmatrix}, \tag{A.14}$$

其中 $\Delta_i$ 为在 $[0,1]$ 内的随机数。这时，

$$\begin{aligned}\langle f_r|G|f_r\rangle =& \frac{1}{n}(e^{-i2\pi\Delta_1}\langle f_1| + e^{-i2\pi\Delta_2}\langle f_2| + \cdots)G(e^{i2\pi\Delta_1}|f_1\rangle + e^{i2\pi\Delta_2}|f_2\rangle + \cdots) \\ =& \frac{1}{n}[\langle f_1|G|f_1\rangle + \langle f_2|G|f_2\rangle + \cdots + \langle f_n|G|f_n\rangle \\ & + e^{-i2\pi(\Delta_1-\Delta_2)}\langle f_1|G|f_2\rangle + e^{-i2\pi(\Delta_1-\Delta_3)}\langle f_1|G|f_3\rangle + \cdots] \\ \approx & \frac{1}{n}[\langle f_1|G|f_1\rangle + \langle f_2|G|f_2\rangle + \cdots + \langle f_n|G|f_n\rangle]\end{aligned} \tag{A.15}$$

由此我们可以得到系统的全局总平均态密度：

$$\rho_t = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle f_r|G|f_r\rangle. \tag{A.16}$$

除了实空间的态密度外，我们还将 Lanczos 方法发展到了动量空间。如果将种子态取为不含无序时的哈密顿量的动量为 k 的本征态，以二维 Rashba 自旋轨道耦合电子气为例：

$$|f_{\mathbf{k}}\rangle = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{r}_1|\mathbf{k}s\rangle \\ \langle \mathbf{r}_2|\mathbf{k}s\rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{r}_N|\mathbf{k}s\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ se^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} \\ \begin{pmatrix} i \\ se^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} i \\ se^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_N} \end{pmatrix}. \tag{A.17}$$

其中 $N = N_x \times N_y$ 为系统总格点数，$\mathbf{r}_i$ 代表格点位置。这时我们可以利用 Lanczos 方法求得加入无序后的动量空间格林函数：

$$G(\mathbf{k}) = \langle f_{\mathbf{k}}|G|f_{\mathbf{k}}\rangle \tag{A.18}$$

由动量空间格林函数，我们可以得到系统的谱函数：

$$A(\mathbf{k}, E) = -\mathrm{Im}G(\mathbf{k}, E) \tag{A.19}$$

若结合戴森方程：$G = G_0 + G_0\Sigma G$，可以得到无序系统的自能函数：

$$\Sigma = G_0^{-1} - G^{-1} = G_0^{-1} - [\langle f_{\mathbf{k}}|G|f_{\mathbf{k}}\rangle]^{-1}. \tag{A.20}$$