

Metody numeryczne

Laboratorium 4

Diagonalizacja macierzy operatora w 2D.

02.04.2020r.

Adrian Furman

1. Wstęp teoretyczny

Diagonalizacją macierzy kwadratowej A nazywamy proces jej rozkładu do następującej postaci iloczynowej $A = P \Delta P^{-1}$, gdzie P to macierz przejścia, której kolumny to kolejne wektory własne macierzy A , natomiast Δ to macierz diagonalna – czyli taka której jedyne niezerowe elementy znajdują się na jej diagonalu. W naszym przypadku wspomniane niezerowe elementy to wartości własne macierzy poddanej diagonalizacji.

Problemem własnym macierzy nazywamy następujące równanie:

$$(A - \lambda I)\vec{x} = 0.$$

Problem ten ma nietrywialne rozwiązanie $\vec{x} \neq \vec{0}$, gdy:

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Rozwiązując otrzymane równanie wielomianowe otrzymujemy zestaw wartości własnych λ_i a następnie jako rezultat dalszych obliczeń odpowiadające tym wartościom wektory własne \vec{x}_i .

Równanie Schrödingera – fundament nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, równanie to pełni rolę analogiczną do zasad dynamiki Newtona, które rządzą mechaniką klasyczną. Jego zaletą w stosunku do mechaniki klasycznej jest fakt iż opisuje ono stan ewolucji układu kwantowego w dokładniejszy sposób.

Gdy układ jest odizolowany od otoczenia – jego energia całkowita nie zmienia się w czasie, wówczas operator Hamiltona - \hat{H} nie zależy jawnie od czasu co prowadzi do uproszczonej postaci równania Schrödingera niezależnej od czasu:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (1)$$

gdzie E to energia układu a ψ to funkcja falowa niezależna od czasu.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Celem zajęć było znalezienie numerycznego rozwiązania równania Schrödingera niezależnego od czasu (1), w dwóch wymiarach.

W takich warunkach operator energii (Hamiltona) przyjmuje następującą postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right),$$

gdzie \hbar to stała Plancka podzielona przez 2π .

Aby możliwe było numeryczne rozwiązanie musimy zdyskretyzować nasze równanie, w tym celu standardowo zastępujemy drugie pochodne ilorazami różnicowymi oraz wprowadzamy siatkę węzłów: $x_i = \Delta \cdot i, i = 1, 2, \dots, n_x$ oraz $y_i = \Delta \cdot j, i = 1, 2, \dots, n_y$, mając na uwadze, że $\psi(x, y) = \psi(x_i, y_j) = \psi_{i,j}$.

Dokonując podstawienia: $-\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} = t$ oraz reindeksacji: $l = j + (i - 1) \cdot n_y, l = 1, 2, \dots, n, n = n_x \cdot n_y$ w zdyskretyzowanej formie równania otrzymujemy jego uproszczoną postać:

$$H\psi = t(\psi_{l-n_y} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+n_y}) = E\psi.$$

Zapisując operator H w formie macierzy kwadratowej $n \times n$, w każdym wierszu jedynymi niezerowymi elementami pozostają:

$$H_{l,l\pm n_y} = H_{l,l\pm 1} = t, \quad H_{l,l} = -4t.$$

Zauważamy, że nasza macierz H jest symetryczną macierzą pięcioprzekątniową.

Do obliczeń przyjęto parametry: $n_x = n_y = 20$, $m = 10$, $t = -0.021$.

Pierwszym krokiem było zredukowanie macierzy H do postaci trójdagonalnej stosując w tym celu funkcję *tred2* z biblioteki *Numerical Recipes*, która w swoim działaniu wykorzystuje rozkład QR **metodą Householdera**. W efekcie działania tej funkcji, macierz H zostaje nadpisana przez macierz przekształcenia P , natomiast w wektorach \vec{d} oraz \vec{e} , które są kolejnymi argumentami wywołania funkcji zapisane są odpowiednio elementy diagonalni oraz poddiagonalni wyjściowej macierzy trójdagonalnej T (macierz jest symetryczna więc ponad diagonalą wartości są takie same jak pod).

$$P^{-1} H P = T$$

Następnie diagonalizujemy macierz T przy użyciu procedury *tqli* korzystającej z algorytmu QL, która jako argumenty przyjmuje wektory \vec{d} , \vec{e} , wymiar macierzy oraz macierz jednostkową Y , w której w kolumnach zapisane zostaną wektory własne. Jeśli chodzi o wartości własne, znajdą się one w wektorze \vec{d} .

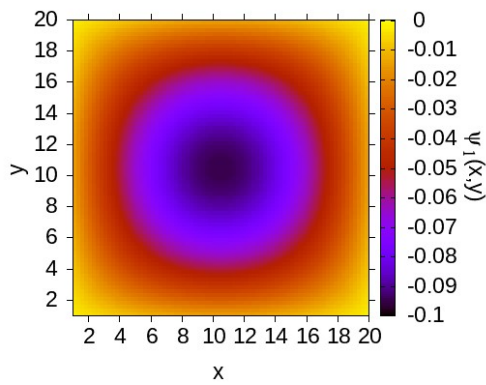
Pamiętając o wcześniejszej redukcji odtwarzamy pierwotne wektory własne wykonując następujące mnożenie:

$$X = P \cdot Y.$$

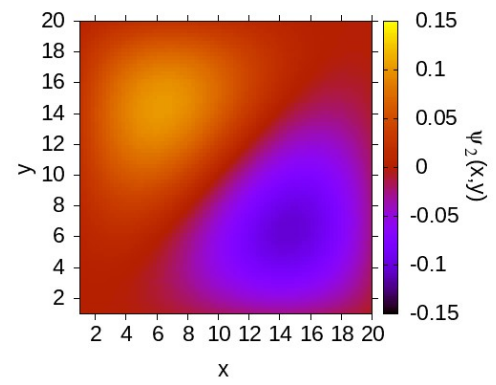
Ostatnią czynnością przed zapisaniem rezultatów do pliku w celu ich późniejszej graficznej reprezentacji jest posortowanie energii (wartości własnych) oraz indeksów wektorów, używając w tym celu pomocniczej tablicy indeksów.

2.2. Wyniki

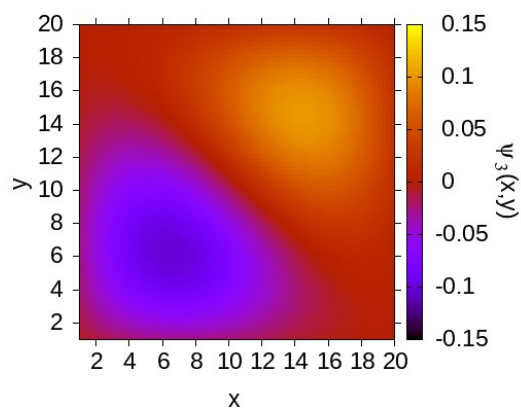
Poniżej zamieszczone zostało 10 wykresów (map falowych) wygenerowanych za pomocą programu gnuplot. Przedstawiają one uzyskane podczas diagonalizacji wektory własne czyli nasze funkcje falowe dla dziesięciu najniższych energii (są to energie poszczególnych stanów) – czyli naszych wartości własnych, które dla każdej z map umieszczone zostały w podpisie.



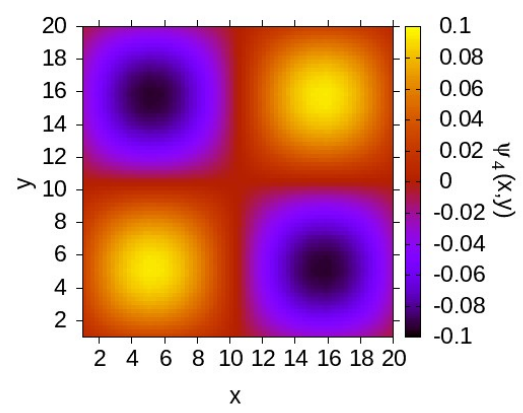
Rysunek 1. $\psi_1(x, y)$, $E_1 = 0.00093821$.



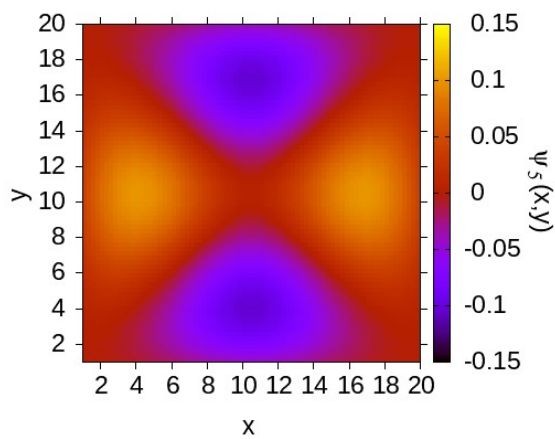
Rysunek 2. $\psi_2(x, y)$, $E_2 = 0.00233504$.



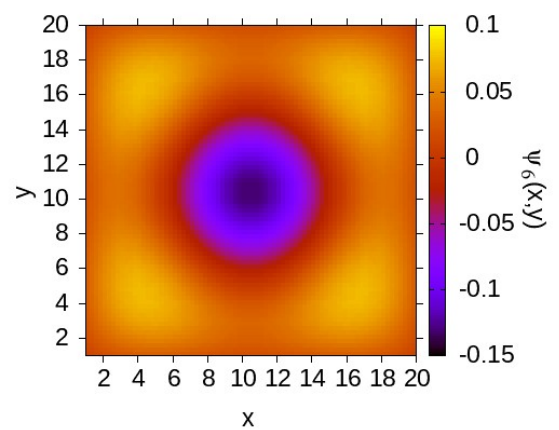
Rysunek 4. $\psi_4(x, y)$, $E_4 = 0.00233512$.



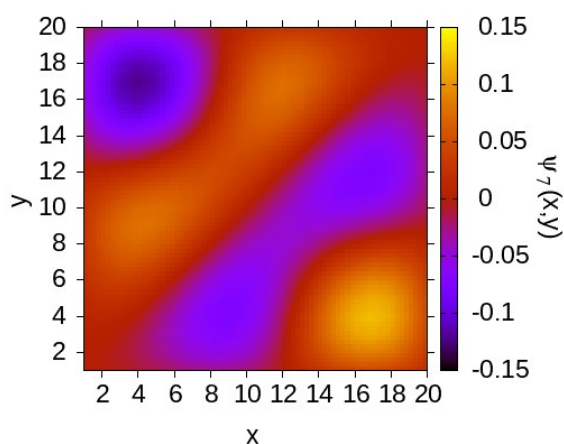
Rysunek 4. $\psi_4(x, y)$, $E_4 = 0.00373193$.



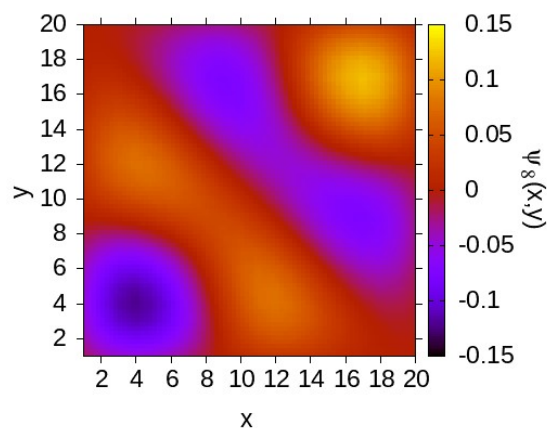
Rysunek 5. $\psi_5(x, y)$, $E_5 = 0.00462838$.



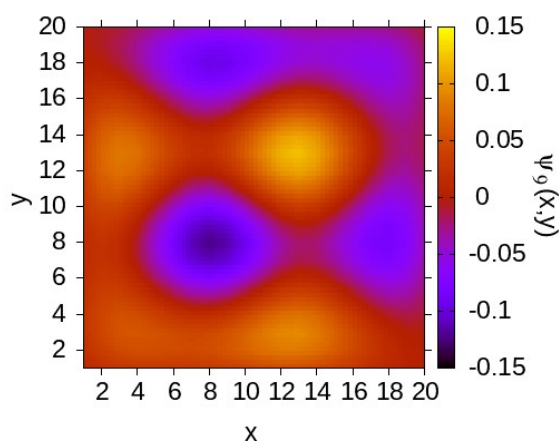
Rysunek 6. $\psi_6(x, y)$, $E_6 = 0.00462851$.



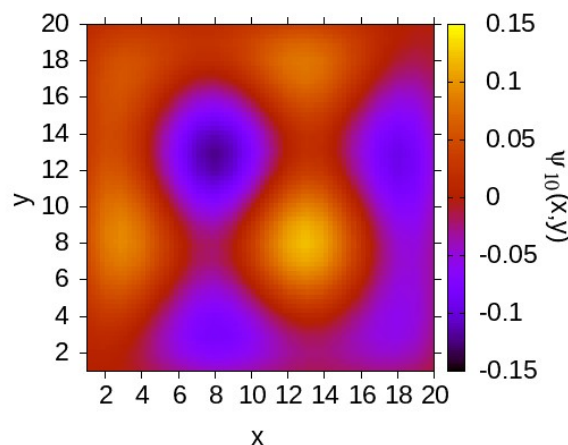
Rysunek 7. $\psi_7(x, y)$, $E_7 = 0.00602518$.



Rysunek 8. $\psi_8(x, y)$, $E_8 = 0.00602525$.



Rysunek 9. $\psi_9(x, y)$, $E_9 = 0.00776708$.



Rysunek 10. $\psi_{10}(x, y)$, $E_{10} = 0.00776711$.

Otrzymane wyniki są zgodne z oczekiwanymi.

Jak doskonale widzimy niektóre energie (wartości własne) są do siebie bardzo zbliżone. Jeśli chodzi o odpowiadające im funkcje (wektory własne) są również podobne z dokładnością do ich orientacji. Może to wynikać z prostej własności algebry liniowej – wektory własne zachowują swoje własności po pomnożeniu przez stałą, w naszym przypadku otrzymane wektory są znormalizowane wskutek działania użytych funkcji z biblioteki numerycznej *Numerical Recipes* więc zakres dostępnych stałych do mnożenia kurczy się do dwuelementowego zbioru: $\{1, -1\}$. Mnożenie przez -1 odpowiada widocznym odbiciom dla wykresów o zbliżonych wartościach własnych. Możemy więc stwierdzić, że dla pojawiających się dwukrotnie wartości własnych ich wektory są identyczne – a w zasadzie bezpieczniej powiedzieć "bardzo zbliżone", z racji, że jesteśmy w świecie obliczeń numerycznych.

3. Wnioski

Duet funkcji *tred2*, która jest jedną z przedstawicielek rozkładu QR i funkcji *tqli*, na której zapleczu stoi algorytm QL przy wsparciu podstawowych własności algebry liniowej świetnie sprawdził się do naszego problemu diagonalizacji macierzy operatora w 2D. W rezultacie zarówno liczbowe wartości energii jak i graficzna reprezentacja odpowiadających im funkcji falowych pokrywają się one z naszymi oczekiwaniami.

Dla zbliżonych wartości własnych (energii) wektory własne (funkcje falowe) są do siebie podobne. Ewentualne odbicia można w łatwy sposób wytłumaczyć powołując się na własność wektorów własnych, według której po pomnożeniu ich przez stałą nadal pozostają one wektorami własnymi. W naszym przypadku z racji znormalizowania jedna z dwóch stałych to -1 i to właśnie ona odpowiada za widoczne odbicia.