Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie,
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Informatyka Stosowana

Kraków, 21.03.2024

Metody Numeryczne

Wyznaczanie Wartości i Wektorów Własnych Macierzy
Metoda Bisekcji

Ireneusz Bugański

1. **Cel ćwiczenia**
   Celem ćwiczenia jest zastosowanie metody bisekcji do znalezienia wektorów własnych oraz wartości własnych.

2. **Opis problemu**
   Zadaniem jest znalezienie wektorów własnych i stowarzyszonych z nimi wartości własnych macierzy Hamiltona dla jednowymiarowego kwantowego oscylatora harmonicznego. Równanie własne operatora energii w tym przypadku ma postać równania Schrödingera:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}\right)\psi(x)=E\psi(x), \tag{1}$$

gdzie $\psi(x)$ – funkcja stanu elektronu o energii E, $\frac{kx^2}{2}$ – potencjał oscylatora harmonicznego, m – masa elektronu, $\hbar$ - stała Plancka podzielona przez 2π. Równanie (1) można zapisać bez stałych fizycznych, przyjmując za jednostkę energii $\hbar\omega$, $\omega = k/m$ oraz za jednostkę długości $\sqrt{\hbar/m\omega}$. W nowych jednostkach rówanie (1) ma postać:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{x^2}{2}\right)\psi(x)=E\psi(x). \tag{2}$$

W obliczeniach numerycznych pochodną zastępuje się ilorazem różnicowym:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\psi(x=x_i)\approx\frac{\psi(x_{i+1})-2\psi(x_i)+\psi(x_{i+1})}{(\Delta x)^2}, \tag{3}$$

gdzie x_i to współrzędna x w i-tym węźle siatki obliczeniowej. Zwykle w obliczeniach przyjmuje się siatkę równoodległych węzłów, gdzie $\Delta x = x_{i+1} - x_i$. Przybliżając różniczkę w równaniu (2) wzorem (3) oraz stosując notację $\psi(x_i) \equiv \psi_i$ otrzymujemy równanie różnicowe:

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{2}x_i\psi_i=E\psi_i. \tag{4}$$

Warunek brzegowy nałożony na funkcję falową wymaga, aby funkcja ta zerowała się w nieskończoności. Siatka obliczeniowa ma N węzłów, więc $\psi_0 = 0$ oraz $\psi_N = 0$, gdzie węzły o numerach 1 oraz N odpowiadają brzegom siatki obliczeniowej. Równanie (4) można przedstawić w postaci macierzowej:

$$
\begin{pmatrix}
h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h_{2,1} & h_{2\,2} & h_{2,3} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-1} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \\ \psi_{N-1}
\end{pmatrix}
= E \begin{pmatrix}
\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \\ \psi_{N-1}
\end{pmatrix}, \tag{5}
$$

gdzie $h_{i,i-1} = h_{i-1,i} = -1/[2(\Delta x)^2]$ dla $i = 2, \ldots, N-1$, $h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + \frac{x_i^2}{2}$, $x_i = -L + i\Delta x$ dla $i = 1, \ldots, N-1$ oraz $\Delta x = 2L/N$, gdzie L – współrzędna końca przedziału x. Macierz (5) jest rzeczywistą macierzą trójprzekątniową.

Znajdź pięć pierwszych wartości własnych i wektorów własnych macierzy (5) oraz nanieś na wspólnym wykresie wektory własne w przedziale $x \in [-L, L]$. Wykorzystaj metodę bisekcji wykonywaną dla $IT\_MAX = 50$ iteracji. Przyjmij $N = 50$ oraz $L = 5$. Porównaj wyniki z wynikami analitycznymi.

3. Opis metody bisekcji

Metoda bisekcji ma zastosowanie w przypadku macierzy trójdiagonalnej symetrycznej i nieredukowalnej. Macierz trójdiagonalna symetryczna i nieredukowalna H jest postaci:

$$
H = \begin{pmatrix}
\delta_1 & \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\
\gamma_1 & \delta_2 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\
0 & \gamma_3 & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \gamma_{N-1} \\
0 & 0 & 0 & \gamma_{N-1} & \delta_N
\end{pmatrix}, \tag{6}
$$

gdzie $\gamma_i, i = 1\colon N-1$ są różnei od 0. Dla tak zdefiniowanej macierzy można pokazać, że wszystkie wartości są rzeczywiste i pojedyncze.

Metoda bisekcji opiera się na określeniu liczby wartości własnych mniejszych niż obrana wartość parametru λ. Dla parametru λ oblicza się ciąg wartości wielomianu charakterystycznego $p_k(\lambda)$ podmacierzy głównej $H^{(k)}$, tj. zawierającej k pierwszych wierszy i k pierwszych kolumn macierzy H. Liczba zmian znaku w ciągu $\{p_k(\lambda)\}$ jest równa liczbie wartości własnych mniejszych niż λ. Wartości $p_k(\lambda)$ można obliczyć w sposób iteracyjny:

$$
\begin{gathered}
p_0(\lambda) = 1 \\
p_1(\lambda) = \delta_1 - \lambda \\
p_k(\lambda) = (\delta_k - \lambda)p_{k-1}(\lambda) + (\gamma_{k-1})^2 p_{k-2}(\lambda), \\
k = 1, \ldots, N.
\end{gathered} \tag{7}
$$

Algorytm wyznaczania i-tej wartości własnej λ_i przebiega następująco:

a) Algorytm jest iteracyjny i wykonuje się założoną przez użytkownika liczbę razy równą IT_MAX. Liczba wykonań określa dokładność przybliżenia λ_i przez λ_j, gdzie λ_j to przbliżenie wartości własnej w j-tej iteracji.

b) W pierwszej iteracji wyznacz przedział $[a, b]$, w którym przewiduje się, że λ_i się znajduje. Przyjmij $\lambda_j = \frac{a+b}{2}$.

c) Wyznacz liczbę n zmian znaku w ciągu $\{p_k(\lambda)\}$.

d) Jeśli $n \leq i$, to w kolejnej iteracji przyjmij przedział $[\lambda_j, b]$, w przeciwnym przypadku przyjmij przedział $[a, \lambda_1]$.

e) Przyjmij jako nowe λ_j środek nowego przedziału, tj. $\lambda_j = \frac{a+\lambda_j}{2}$ lub $\lambda_j = \frac{b+j}{2}$ w zależności od tego, który warunek w d) jest spełniony

f) Powtarzaj punkty c) i d) i e) IT_MAX razy

Wektor własny $\mathbf{x}_i$ dla wartości własnej λ_i można otrzymać rekurencyjnie:

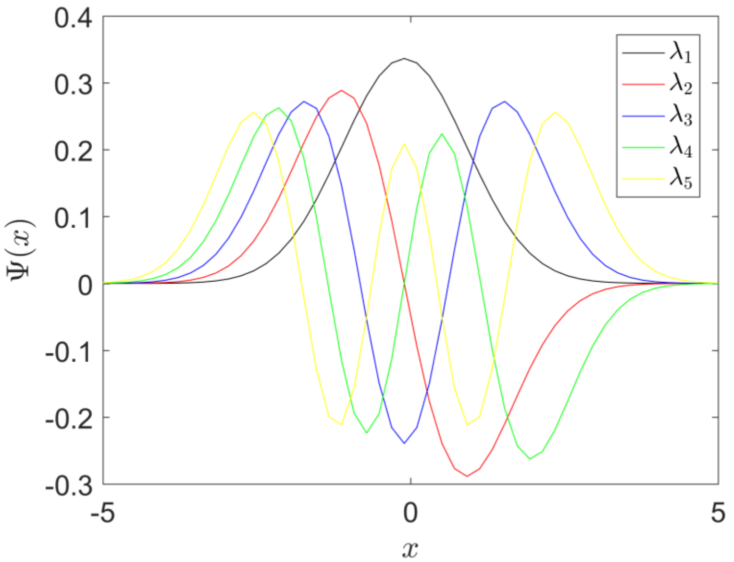
$$x_i^1 = 1$$
$$x_i^2 = \frac{\lambda_i - \delta_1}{\gamma_1} \tag{8}$$
$$x_i^n = \frac{(\lambda_i - \delta_n)x_i^{n-1} - \gamma_{n-2}x_i^{n-2}}{\gamma_{n-1}},$$

gdzie x_i^n to n-ta współrzędna i-tego wektora własnego. Wektor należy na koniec unormować, tzn. $\mathbf{x}_i = \frac{\mathbf{x}_i}{x_i}$, gdzie x_i – długość wektora $\mathbf{x}_i$. Długość wektora obliczana jest z normy Euklidesowej.

4. Rozwiązanie

Kolejne wartości własne są równe: 0.4987, 1.4947, 2.4836, 3.4685, 4.4481

Na Rysunku 1. Przedstawiono wykresy wektorów własnych.



Rysunek 1. Wykres kolejnych wektorów własnych oscylatora harmonicznego.