

Metody Numeryczne

Metoda bezpośrednia rozwiązywania problemu własnego

Rozkład QR metodą Householdera

Ireneusz Bugański

1. Problem do rozwiązania

Zadaniem jest wyznaczenie widma wibracyjnego cząstki acetyleny. Acetylen jest cząstką liniową o dwóch atomach węgla oraz dwóch atomach wodoru (Rys. 1.). Układ po wychyleniu z położenia równowagi będzie drgał zgodnie z poniższymi równaniami ruchu:

$$\begin{aligned} m_H \frac{d^2 x_1}{dt^2} &= -k_{CH} x_1 + k_{CH} x_2, \\ m_C \frac{d^2 x_2}{dt^2} &= k_{CH} x_1 - (k_{CH} + k_{CC}) x_2 + k_{CH} x_3 + k_{CC} x_4, \\ m_C \frac{d^2 x_3}{dt^2} &= k_{CC} x_2 - (k_{CH} + k_{CC}) x_3 + k_{CH} x_4, \\ m_H \frac{d^2 x_4}{dt^2} &= k_{CH} x_3 - k_{CH} x_4, \end{aligned} \quad (1)$$

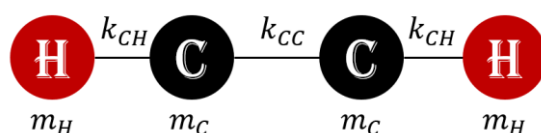
gdzie m_H, m_C – odpowiednio masa atomu wodoru oraz węgla, k_{CH}, k_{CC} – stałe siłowe oddziaływania węgiel-wodór oraz węgiel-węgiel, $x_i, i = 1, 2, 3, 4$ – wychylenie atomu i z położenia równowagi. Rozwiązanie układu równań jest równanie postaci $x_i(t) = A_i \exp(i\omega t)$, gdzie ω jest częstością drgań cząstki. Układ równań (1) można zapisać w sposób macierzowy, tj.

$$\begin{pmatrix} \frac{k_{CH}}{m_H} & -\frac{k_{CH}}{m_H} & 0 & 0 \\ -\frac{k_{CH}}{m_C} & \frac{k_{CH} + k_{CC}}{m_C} & -\frac{k_{CC}}{m_C} & 0 \\ 0 & -\frac{k_{CC}}{m_C} & \frac{k_{CH} + k_{CC}}{m_C} & -\frac{k_{CH}}{m_C} \\ 0 & 0 & -\frac{k_{CH}}{m_H} & \frac{k_{CH}}{m_H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Równanie (2) prezentuje problem własny $D\mathbf{A} = \lambda\mathbf{A}$, gdzie wektor $\mathbf{A} = (A_1 \ A_2 \ A_3 \ A_4)^T$ jest wektorem własnym, a $\lambda = \omega^2$ wartością własną macierzy współczynników D .

Zadania do wykonania:

1. Zdefiniować macierz współczynników D , przyjmując $k_{CH} = 5.92 \cdot 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$, $k_{CC} = 15.8 \cdot 10^2 \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$, $m_H = 1 \text{ amu}$, $m_C = 12 \text{ amu}$, $1 \text{ amu} = 1.6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.
2. Wykorzystując metodę Householdera, znaleźć rozkład QR macierzy D . Macierz $D = QR$, gdzie Q – macierz ortogonalna ($Q^T Q = I$) oraz R – macierz trójkątna górna.
3. Wykonując iteracyjnie rozkład QR znajdź wektory własne macierzy D .
4. Po wykonaniu $IT = 200$ iteracji wyznacz wektory własne macierzy D .
5. W sprawozdaniu wypisz wartości i wektory własne macierzy D .



Rys. 1. Cząstka acetyleny wraz ze stałymi zadania

2. Rozkład QR metodą Householdera

Poniższe kroki obliczeniowe pozwalają uzyskać rozkład QR macierzy D :

1. Zdefiniuj macierz $R = D$ oraz $Q = I$. Rozmiar macierzy Q jest taki sam jak macierzy D (w przypadku macierzy symetrycznej)
2. Dalsze operacje wykonaj w pętli wykonującej się $N - 1$ razy, gdzie N jest wymiarem macierzy D .
3. Znajdź wektor $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \|\mathbf{x}\|\mathbf{e}$, gdzie \mathbf{x} jest i -tym wektorem kolumnowym macierzy R (i jest również numerem iteracji), gdzie wszystkie elementy wektora o indeksie mniejszym niż i są wyzerowane; \mathbf{e} jest wektorem, którego wszystkie elementy są równe 0, z wyjątkiem elementu i – go, który wynosi 1.
4. Znajdź wektor $\mathbf{v} = \mathbf{u}/\|\mathbf{u}\|$.
5. Znajdź macierz $Q_t = I - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T$.
6. Wykonaj działania: $Q = Q_t Q$ oraz $R = Q_t R$.
7. Po zakończeniu działania pętli otrzymana macierz R jest macierzą górnątrójkątną. Aby otrzymać poprawną macierz Q musimy do zmiennej przechowującej macierz Q przypisać jej transpozycję, tj. wykonać operację $Q = Q^T$.
8. Można sprawdzić, że $D = QR$.

3. Wyznaczenie wartości i wektorów własnych

Wartości własne wyznacza się poprzez iteracyjnie:

1. Przyjmij macierz $H = D$ oraz $P = I$.
2. Kolejne operacje wykonaj w pętli $IT = 200$ iteracji.
3. Znajdź rozkład $H = QR$.
4. Przypisz do zmiennej $H = RQ$ – odwrócony iloczyn macierzy Q i R .
5. Przypisz do zmiennej $P = PQ$.

Po zakończeniu działania pętli, otrzymana macierz H ma na diagonalu kolejne wartości własne macierzy D .

Aby wyznaczyć i -ty wektor własny \mathbf{x}_i macierzy H należy wykonać operacje:

$$\mathbf{x}_i(j) = \begin{cases} 0, & j > i \\ 1 & j = i \\ -\frac{\sum_{k=j+1}^i H(j, k)\mathbf{x}_i(k)}{H(j, j) - H(i, i)} & j < i \end{cases} \quad (3)$$

Wektory \mathbf{x}_i należy znormalizować, tj. podzielić wektor przez jego długość. Wektor własny macierzy D można otrzymać, mnożąc wektor \mathbf{x}_i przez macierz P , tj. $\mathbf{A}_i = P\mathbf{x}_i$.

Rozwiązanie:

$$\omega_1^2 = 4.0502e29 \frac{1}{s}, \omega_2^2 = 3.8611e29 \frac{1}{s}, \omega_3^2 = 1.3945e29 \frac{1}{s}, \omega_4^2 = 0 \frac{1}{s}$$

lub

$$\omega_1^2 = 673.0415, \omega_2^2 = 6.41.3333, \omega_3^2 = 231.6251, \omega_4^2 = 0$$

dla wyników, gdzie masa została podana w amu, a nie w kilogramach.

Wektory własne:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0.7006 \\ -0.0959 \\ 0.0959 \\ -0.7005 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0.7047 \\ -0.0587 \\ -0.0587 \\ 0.7047 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} 0.6040 \\ 0.3677 \\ -0.3677 \\ -0.6040 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_4 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$