Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej
Kierunek: Informatyka Stosowana
Rok: 2020/21
Semsetr: letni
Typ: stacjonarne
Nr albumu: 401984
Data: 22.03.2021

Sprawozdanie - Laboratorium nr 4
Obliczanie wektorów i wartości własnych za pomocą bisekcji

Spis treści

opracował:
Tomasz Szkaradek

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Wektor, wartość oraz problem własny

Niech A będzie kwadratową macierzą $n \times n$. Wówczas A wyznacza przekształcenie liniowe przestrzeni $\mathbb{R}$ w siebie. Niech $v \in R_n$ będzie pewnym niezerowym wektorem oraz niech $L = t \cdot v : t \in \mathbb{R}$ będzie prostą wyznaczoną przez ten wektor. Jeżeli przekształcenie A przekształca prostą L w siebie, to mówimy, że v jest wektorem własnym przekształcenia A. Oznacza to że problem własny macierzy możemy zapisać w postaci równania liniowego

$$A \cdot v = \lambda \cdot v$$

dla pewnej liczby rzeczywistej λ zwanej wartością własną związaną z wektorem własnym v. Obliczenie tego równania jest zwykle skomplikowane. W przypadku macierzy symetrycznej oraz hermitowskiej możemy skorzystać z metody bisekcji. Dzięki własnościom i wektorom własnym możemy np. dokonać diagonalizacji, która z kolei może być przydatna do rozwiązywania układów równań różniczkowych. Często przy tworzeniu modeli matematycznych wykorzystywanych do symulacji zjawisk fizycznych czy zachowania się układu, zachodzi potrzeba rozwiązania problemu własnego

1.2 Metoda bisekcji

Metoda bisekcji zwana również metodą połowienia lub wyszukiwaniem binarnym pozwala stosunkowo szybko znaleźć pierwiastek dowolnej funkcji w zadanym przedziale poszukiwań [a,b]. Aby można było zastosować metodę bisekcji dla poszukiwania wartości własnej w macierzy, muszą być spełnione warunki początkowe tj. macierz jest trójdiagonalna oraz hermitowska załóżmy że:

$$J = \begin{bmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix} \tag{1}$$

Szukamy wielomianu charakterystycznego J_i: W(λ) rozwijając wyznacznik względem kolejnych kolumn macierzy.
Na początku $\omega_0 = 1$ następne wartości obliczamy według wzoru

$$\omega_i(\lambda) = det(J_i - \lambda I) \tag{2}$$

1. jeżeli $\omega_i(\lambda) = 0$ dla pewnego $i < n$, to

$$\omega_{i-1}\omega_{i+1} < 0$$

2. jeżeli $w_n(\lambda) = w(\lambda)$ jest różne od 0, to liczba zmian znaków sąsiednich liczb $\omega_0(\lambda), \omega_0(\lambda), \cdots \omega_b(\lambda)$jest równa liczbie wartości własnych macierzy J mniejszych od λ.

3. Jeżeli $w_n(\lambda) = 0$, to λ jest wartością własną macierzy J, a ponadto jest tyle wartości własnych mniejszych niż λ, ile nastąpiło zmian znaków w ciągu $\omega_0(\lambda), \omega_0(\lambda), \cdots \omega_b(\lambda)$

Metoda bisekcji jest bardzo dokładna. Wadą jest uzyskiwanie dużych wartości ciągu: $\omega_0(\lambda), \omega_0(\lambda), \cdots \omega_b(\lambda)$, jeśli λ znacznie różni się od wartości własnych J. Zaletą natomiast możliwość obliczenia wartości własnej o określonym indeksie k. Liczba iteracji potrzebna do wyznaczenia λ_k wynosi:

$$IT = log_2 \frac{\beta_0 - \alpha_0}{\rho}$$

α_0, β_0 - przedział poszukiwań wartości własnej
ρ – dokładność wyznaczenia wartości własnej

1.3 Twierdzenie Gershgorina

Twierdzenie Gerszgorina – twierdzenie pozwalające nałożyć ograniczenia na wartości własne macierzy o współczynnikach rzeczywistych lub zespolonych. Jeżeli $A_{[n,n]}$ jest macierzą, a , O_j j=1,2,$\cdots$,n okręgami o środkach w a_{jj} i promieniach równych odpowiednio

$$r_j = \sum_{k=1 k \neq j}^{n} |a_{jk}|$$

to wszystkie wartości własne tej macierzy leżą we wnętrzu sumy okręgów O_j , czyli:

$$\lambda_{min} \geqslant min_j(a_{jj} - \sum_{k=1 k \neq j}^{n} |a_{jk}|)$$

$$\lambda_{max} \geqslant max_j(a_{jj} - \sum_{k=1 k \neq j}^{n} |a_{jk}|)$$

Twierdzenie to pozwala na szybkie wyznaczenie przedziału, w którym znajdują się wartości własne danej macierzy.

2 Zadanie do wykonania

Podczas 4 laboratoriów byliśmy zobligowani do poszukiwania rozwiązanie równania Schrodingera czyli typowym problemu własnym w fizyce będącego równaniem własnym operatora energii:

$$-\frac{h}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{3}$$

gdzie V(r)— jest energią potencjalną, ψ(r)— funkcją falową zaś E - energią odpowiadającą funkcji ψ(r). Spróbujmy znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla cząstki o masie m umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego V(x)=$\frac{kx^2}{2}$. Jeśli za jednostkę energii przyjmiemy hω (gdzie ω^2=k/m) a jednostkę długości $\sqrt{h/m\omega}$ to równanie (3) przyjmie postać:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)\frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{4}$$

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania ilorazem różnicowym:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x = x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2} \tag{5}$$

możemy ustawić równanie iteracyjne na $\psi_i = \psi(x_i)$

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E \tag{6}$$

żądając zerowania się funkcji falowej ψ(x) w nieskończonościach $\psi(x = L \longrightarrow -\inf) = \psi_0 = 0$ i $\psi(x = +L \longrightarrow +\inf) = \psi_N = 0$ równanie (6) można przedstawić w postaci macierzowej jako:

$$\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix}$$

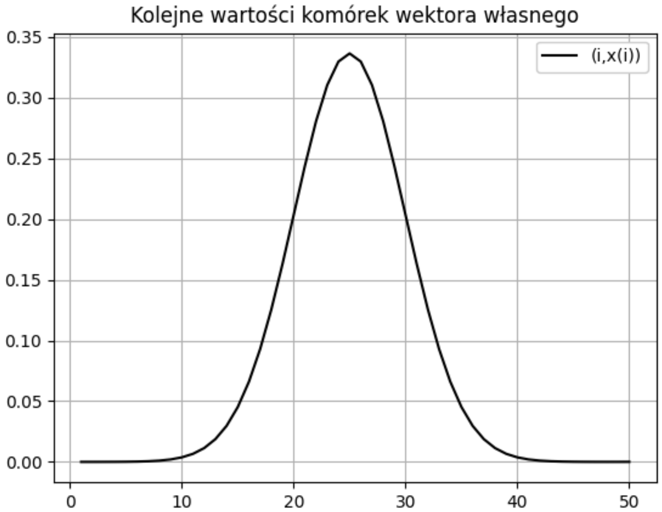
gdzie $h_{i,i-1} = h_{i-1,1}, i = -1/[2(\triangle\ x)2]$ dla i= 2,...,N-1, $h_{i,i} = (\triangle\ x)^{-2} + x_i^2/2$, $\quad x_i = -L + i\ \triangle$ x dla i= 1,...,N-1 oraz $\triangle\ x = 2L/N$

3 Wyniki

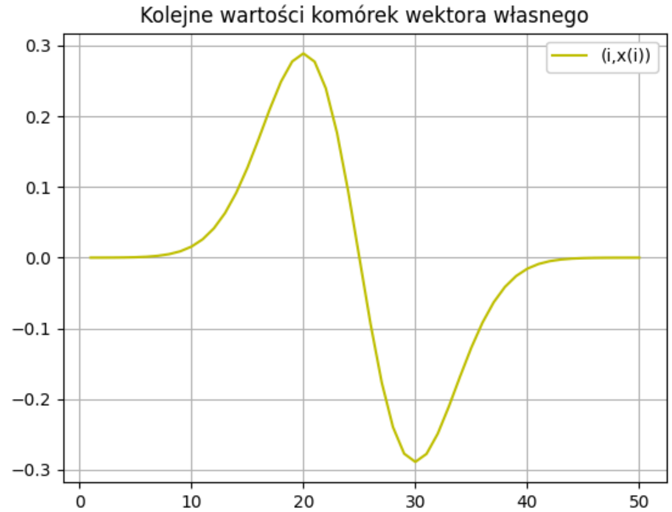
Cały program został napisany w języku Python obliczenia zostały prowadzone na liczbach zmiennoprzecinkowych. Wykorzystujemy napisane funkcje do obliczenia kolejnych wartości własnych to jest:

$$\begin{gathered} \lambda_1{=}0.499 \\ \lambda_2{=}1.494 \\ \lambda_3{=}2.484 \\ \lambda_4{=}3.468 \\ \lambda_5{=}4.448 \\ \vdots \end{gathered}$$

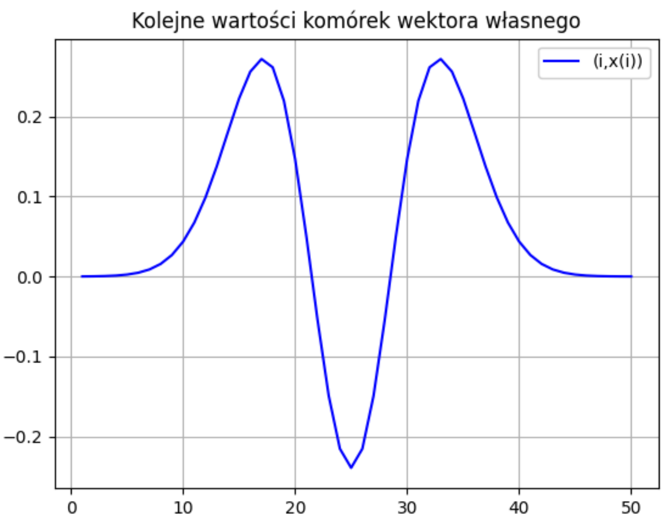
A następnie na ich podstawie wyliczyliśmy wektory własne które nanieśliśmy na wykresy narysowane również w Pythonie za pomocą biblioteki matplotlib. Wyniki programu możemy zaobserwować na wykresach poniżej:



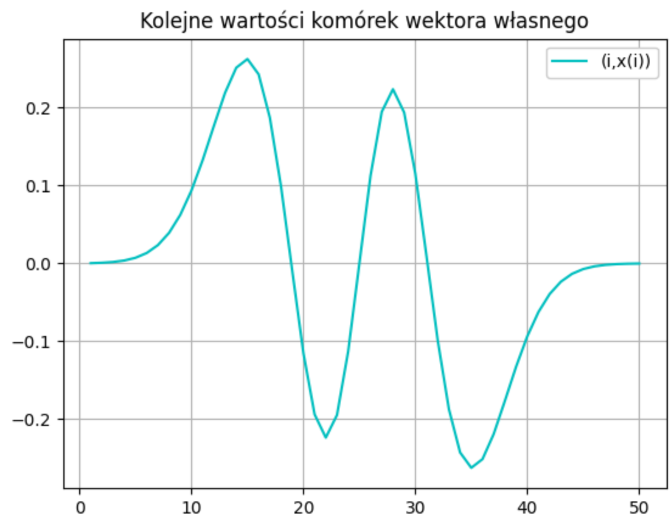
(a) λ_1=0.499



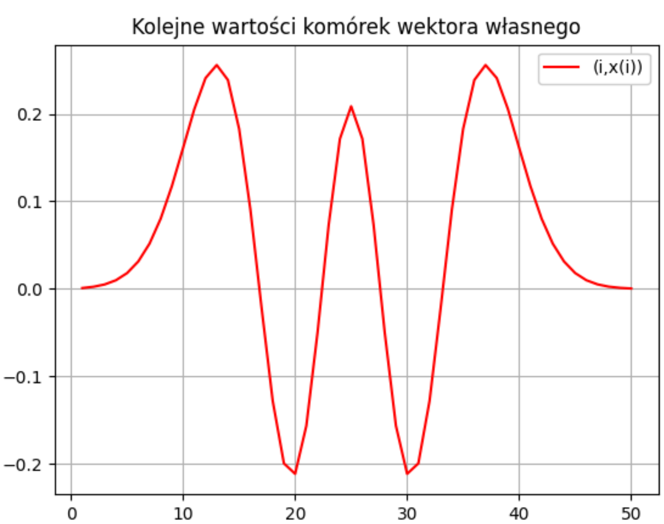
(b) λ_2=1.494



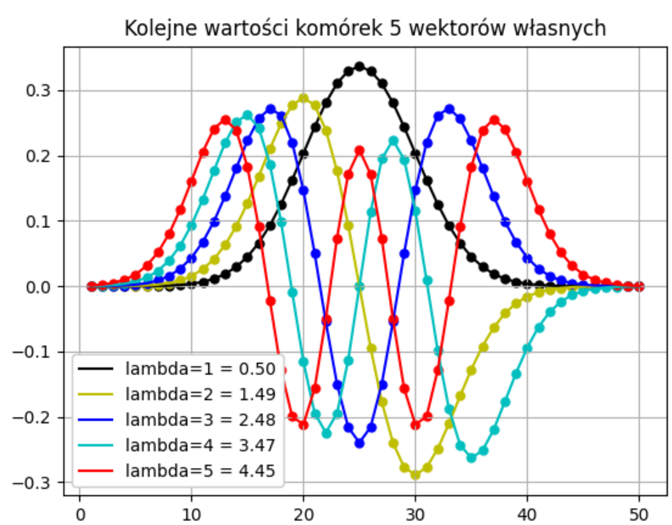
(c) λ_3=2.484



(d) λ_4=3.468



(e) λ_1=0.499



4 Podsumowanie

Znalezienie wartości własnych i wektorów własnych dla macierzy, nawet stosunkowo małej i symetrycznej, jest niezwykle skomplikowane. Dzięki metodzie bisekcji i jej implementacji udało nam się szybko znaleźć własności własne. Innymi zaletami obliczania własności własnych za pomocą bisekcji jest to iż jest może być ona bardzo dokładna oraz to iż za jej pomocą jesteśmy w stanie obliczyć dowolny k -tą wartość własną, wadą jest uzyskiwanie dużych wartości ciągu $w_n(\lambda)$, jeśli λ znacznie różni się od wartości własnych. Warto zauważyć, że funkcja eigenvalue nie operuje na całej macierzy, a jedynie na określonych wartościach na wstędze (co wynika z warunku stosowania tego algorytmu) dzięki czemu oszczędzana jest pamięć i złożoność.

5 Literatura

[1] Tomasz Chwiej, Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy
http : //home.agh.edu.pl/ chwiej/mn/diagonalizacja_2018.pdf

[2] Michał Pazdanowski, Twierdzenie Gerszgorina macierzy
https : //www.cce.pk.edu.pl/ michal/pdfy/Metody13.pdf

[3] Krzysztof Malarz, Wektory i wartości własne
https : //www.cce.pk.edu.pl/ michal/pdfy/Metody13.pdf