

# **Método de matriz directa**

## **Aplicación a ecuación de Schrödinger bidimensional independiente del tiempo con algoritmo de Lanczos.**

Reinaldo Magallanes Saunders

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación

13 de Agosto 2021

### Resumen

- Ecuación de Schrödinger bidimensional

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y)$$

- Grilla rectangular y aproximación de derivadas por diferencias finitas
- Ordenamiento natural para llevar la matriz de la función de onda a un vector
- Autovalores de la matriz del Hamiltoniano por algoritmo de Lanczos

### Oscilador Armónico

$$V(x, y) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

Existe solución analítica con energías:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \deg(E_n) = n + 1$$

### Pozo Rectangular Infinito

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |x| < a/2, |y| < b/2 \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}, \quad a, b > 0$$

Existe solución analítica con energías:

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right), \quad n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots$$

### Pozo Gaussiano

$$V_g(x, y) = -V_0 e^{-\alpha(x^2+y^2)}, \quad V_0, \alpha > 0$$

No existe solución analítica pero admite al menos un estado ligado.

#### **Teorema**

Un potencial atractivo, arbitrariamente débil, tal que

$$\int V(x) d^n x < 0, \quad n = 1, 2$$

admite un estado ligado.

*Bound States in one and two Spatial Dimensions.*  
*Chadan, Khuri, Martin & Wu (2002)*

### Serie de Taylor

Para una función  $f(x)$  y un paso  $\Delta x$ :

$$f(x \pm \Delta x) = f(x) \pm f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2}(\Delta x)^2 \pm \frac{f'''(x)}{6}(\Delta x)^3 + \mathcal{O}((\Delta x)^4)$$

$$f(x - \Delta x) + f(x + \Delta x) = 2f(x) + (\Delta x)^2 f''(x) + \mathcal{O}((\Delta x)^4)$$

**Aproximación de diferencia central de la derivada segunda:**

$$f''(x) = \frac{f(x - \Delta x) - 2f(x) + f(x + \Delta x)}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2)$$

Ecuación de Schrödinger:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y)$$

Grilla equiespaciada  $N \times N$  con

- Condiciones de contorno:

$$\psi(x_0, y) = \psi(x_{N-1}, y) = 0, \quad \psi(x, y_0) = \psi(x, y_{N-1}) = 0$$

- Espaciado

$$\Delta x = x_j - x_{j-1}, \quad \Delta y = y_j - y_{j-1}$$

- Notación

$$\psi_{i,j} = \psi(x_i, y_j), \quad V_{i,j} = V(x_i, y_j)$$

Aproximación de las derivadas:

$$\begin{aligned} & \frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\psi_{i-1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{i,j-1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j+1}}{(\Delta y)^2} \right] + V_{i,j}\psi_{i,j} \\ & = E\psi_{i,j} + \mathcal{O}(\max[(\Delta x)^2, (\Delta y)^2]), \quad i, j = 1, 2, \dots, N-2. \end{aligned}$$

Introducción de parámetros:

$$\eta = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}, \quad \mu = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta y)^2}, \quad \nu_{i,j} = 2(\eta + \mu) + V_{i,j}$$

Hasta ahora:

$$-\mu\psi_{i,j-1} - \eta\psi_{i-1,j} + \nu_{i,j}\psi_{i,j} - \eta\psi_{i+1,j} - \mu\psi_{i,j+1} = E\psi_{i,j}$$



Llevar la matriz  $(N - 2) \times (N - 2)$  de la función de onda a un vector  $\psi$ ,  $(N - 2)^2$ -dimensional, columna por columna.

$$\begin{bmatrix} \psi_{1,1} & \psi_{1,2} & \psi_{1,3} & \dots & \psi_{1,N-2} \\ \psi_{2,1} & \psi_{2,2} & \psi_{2,3} & \dots & \psi_{2,N-2} \\ \psi_{3,1} & \psi_{3,2} & \psi_{3,3} & \dots & \psi_{3,N-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N-2,1} & \psi_{N-2,2} & \psi_{N-2,3} & \dots & \psi_{N-2,N-2} \end{bmatrix}$$

↓

$$\psi = (\psi_{1,1}, \psi_{2,1}, \dots, \psi_{N-2,1}, \psi_{1,2}, \dots, \psi_{1,N-2}, \psi_{2,N-2}, \dots, \psi_{N-2,N-2})$$

Nuevo índice  $k$  tal que:

- El par  $(x_1, y_1)$  se corresponde con  $k = 0$ .
- Incremento en 1 en el índice  $i$  ( $x$ )  $\implies$  incremento en 1 en el índice  $k$ .
- Incremento en 1 en el índice  $j$  ( $y$ )  $\implies$  incremento en  $N - 2$  en el índice  $k$ .

$$\psi_k \iff \psi_{i,j}$$

$$k = (i - 1) + (j - 1)(N - 2) \iff \begin{cases} i = [k \bmod (N - 2)] + 1 \\ j = \left\lfloor \frac{k}{N - 2} \right\rfloor + 1 \end{cases}$$

Cambio de índices:

$$-\mu\psi_{i,j-1} - \eta\psi_{i-1,j} + \nu_{i,j}\psi_{i,j} - \eta\psi_{i+1,j} - \mu\psi_{i,j+1} = E\psi_{i,j}$$

$\downarrow$

$$\begin{aligned} -\mu\psi_{k-(N-2)} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+(N-2)} &= E\psi_k, \\ k &= 0, 1, \dots, (N-2)^2 - 1 \end{aligned}$$

donde

$$m \notin \{0, 1, \dots, (N-2)^2 - 1\} \implies \psi_m = 0$$

Forma matricial:

$$H\psi = E\psi$$

$$-\mu\psi_{k-(N-2)} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+(N-2)} = E\psi_k$$

Observaciones:

- H es una matriz  $(N-2)^2 \times (N-2)^2$ .
- Los términos  $-\eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1}$  se corresponden con una parte tridiagonal de H. Diagonales  $-1$ ,  $0$  y  $1$ .
- Los términos  $-\mu\psi_{k-(N-2)}$  y  $-\mu\psi_{k+(N-2)}$  se corresponden con las diagonales  $-(N-2)$  y  $(N-2)$ .
- El cambio de índices  $i, j \rightarrow k$  presenta una 'discontinuidad' en los casos donde  $k$  o  $k+1$  es múltiplo de  $(N-2)$ . Ninguno de los valores permitidos de  $k$  cae en el borde de la grilla.

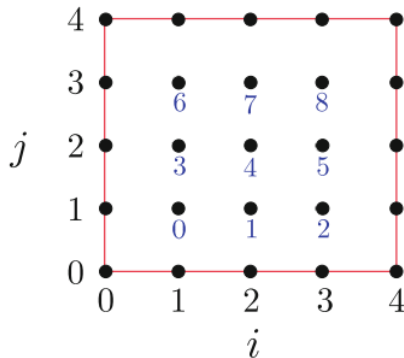
**Caso  $N = 5$ .**

Condiciones de contorno:

$$\psi_{0,j} = \psi_{4,j} = \psi_{i,0} = \psi_{i,4} = 0$$

Como  $N - 2 = 3$ ,  $H$  es una matriz  $9 \times 9$  y  $\psi$  es un vector

9-dimensional cuyas componentes satisfacen:



$$-\mu\psi_{k-3} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+3} = E\psi_k,$$

$$k = 0, 1, \dots, 8, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

$$\begin{aligned}
 -\mu\psi_{k-3} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+3} &= E\psi_k, \\
 k &= 0, 1, \dots, 8, \quad i, j = 1, 2, 3.
 \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl}
 k=0 & \rightarrow & \emptyset \quad \emptyset \quad +\nu_{1,1}\psi_0 \quad -\eta\psi_1 \quad -\mu\psi_3 = E\psi_0 \\
 k=1 & \rightarrow & \emptyset \quad -\eta\psi_0 \quad +\nu_{2,1}\psi_1 \quad -\eta\psi_2 \quad -\mu\psi_4 = E\psi_1 \\
 k=2 & \rightarrow & \emptyset \quad -\eta\psi_1 \quad +\nu_{3,1}\psi_2 \quad +0 \quad -\mu\psi_5 = E\psi_2 \\
 k=3 & \rightarrow & -\mu\psi_0 \quad +0 \quad +\nu_{1,2}\psi_3 \quad -\eta\psi_4 \quad -\mu\psi_6 = E\psi_3 \\
 k=4 & \rightarrow & -\mu\psi_1 \quad -\eta\psi_3 \quad +\nu_{2,2}\psi_4 \quad -\eta\psi_5 \quad -\mu\psi_7 = E\psi_4 \\
 k=5 & \rightarrow & -\mu\psi_2 \quad -\eta\psi_4 \quad +\nu_{3,2}\psi_5 \quad +0 \quad -\mu\psi_8 = E\psi_5 \\
 k=6 & \rightarrow & -\mu\psi_3 \quad +0 \quad +\nu_{1,3}\psi_6 \quad -\eta\psi_7 \quad \emptyset = E\psi_6 \\
 k=7 & \rightarrow & -\mu\psi_4 \quad -\eta\psi_6 \quad +\nu_{2,3}\psi_7 \quad -\eta\psi_8 \quad \emptyset = E\psi_7 \\
 k=8 & \rightarrow & -\mu\psi_5 \quad -\eta\psi_7 \quad +\nu_{2,3}\psi_8 \quad \emptyset \quad \emptyset = E\psi_8
 \end{array} \right.$$

$$H = \left[ \begin{array}{ccc|ccc|ccc} \nu_{1,1} & -\eta & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\eta & \nu_{2,1} & -\eta & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\eta & \nu_{3,1} & 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\mu & 0 & 0 & \nu_{1,2} & -\eta & 0 & -\mu & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 & -\eta & \nu_{2,2} & -\eta & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & -\mu & 0 & -\eta & \nu_{3,2} & 0 & 0 & -\mu \\ \hline 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & 0 & \nu_{1,3} & -\eta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & -\eta & \nu_{2,3} & -\eta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 & -\eta & \nu_{3,3} \end{array} \right]$$

↓

$$H = \begin{bmatrix} \mathbb{V}_1 & -\mu \mathbb{I}_3 & 0 \\ -\mu \mathbb{I}_3 & \mathbb{V}_2 & -\mu \mathbb{I}_3 \\ 0 & -\mu \mathbb{I}_3 & \mathbb{V}_3 \end{bmatrix}, \quad \text{donde,} \quad \mathbb{V}_j = \begin{bmatrix} \nu_{1,j} & -\eta & 0 \\ -\eta & \nu_{2,j} & -\eta \\ 0 & -\eta & \nu_{3,j} \end{bmatrix}$$

### Caso general:

$$H = \begin{bmatrix} \mathbb{V}_1 & -\mu \mathbb{I}_{N-2} & 0 & \dots & 0 \\ -\mu \mathbb{I}_{N-2} & \mathbb{V}_2 & -\mu \mathbb{I}_{N-2} & \dots & 0 \\ 0 & -\mu \mathbb{I}_{N-2} & \mathbb{V}_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbb{V}_{N-2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{V}_j = \begin{bmatrix} \nu_{1,j} & -\eta & 0 & \dots & 0 \\ -\eta & \nu_{2,j} & -\eta & \dots & 0 \\ 0 & -\eta & \nu_{3,j} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \nu_{N-2,j} \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2, \dots, (N-2).$$



## Método de Matriz Directa - Grilla $N_x \times N_y$ .

---

Para una grilla  $N_x \times N_y$ :

- El índice  $k$  queda relacionado con  $(i, j)$  por:

$$k = (i - 1) + (j - 1)(N_x - 2) \iff \begin{cases} i = [k \bmod (N_x - 2)] + 1 \\ j = \left\lfloor \frac{k}{N_x - 2} \right\rfloor + 1 \end{cases}$$

- Las componentes de  $\psi$  satisfacen:

$$-\mu\psi_{k-(N_x-2)} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+(N_x-2)} = E\psi_k, \\ k = 0, 1, \dots, (N_x - 2)(N_y - 2) - 1.$$

- H es una matriz  $(N_x - 2)(N_y - 2) \times (N_x - 2)(N_y - 2)$  tridiagonal en bloques con submatrices  $(N_x - 2) \times (N_x - 2)$ .

$$H = \begin{bmatrix} \mathbb{V}_1 & -\mu \mathbb{I}_{N_x-2} & 0 & \dots & 0 \\ -\mu \mathbb{I}_{N_x-2} & \mathbb{V}_2 & -\mu \mathbb{I}_{N_x-2} & \dots & 0 \\ 0 & -\mu \mathbb{I}_{N_x-2} & \mathbb{V}_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbb{V}_{N_y-2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{V}_j = \begin{bmatrix} \nu_{1,j} & -\eta & 0 & \dots & 0 \\ -\eta & \nu_{2,j} & -\eta & \dots & 0 \\ 0 & -\eta & \nu_{3,j} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \nu_{N_x-2,j} \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2, \dots, (N_y - 2).$$

## Algoritmo de Lanczos

---

Algoritmo iterativo particularmente útil cuando se buscan autovalores de una matriz Hermitiana en los extremos del espectro.

Si  $H$  es una matriz  $M \times M$ :

- Vectores  $M$ -dimensionales  $|q_0\rangle = 0$  y  $|q_1\rangle$ , arbitrario y normalizado.
- Para  $1 \leq j < M$ :

$$|w_{j+1}\rangle = H|q_j\rangle - \alpha_j|q_j\rangle - \beta_j|q_{j-1}\rangle, \quad |q_{j+1}\rangle = \frac{1}{\beta_{j+1}}|w_{j+1}\rangle$$

donde

$$\alpha_j = \langle q_j | H | q_j \rangle, \quad \beta_j = \langle w_j | w_j \rangle^{\frac{1}{2}}$$

Luego de  $k$  iteraciones:

- Conjunto ortonormal de vectores  $\{|q_1\rangle, |q_2\rangle, \dots, |q_k\rangle\}$ .
- Matriz tridiagonal simétrica  $T_k$ :

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \dots & 0 \\ 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_k \end{bmatrix}$$

Los autovalores de  $T_k$  convergen a los autovalores de  $H$ . Los autovalores en los extremos del espectro convergen primero.

Lo fundamental es la selección de la grilla. Deben cumplirse las condiciones de contorno.

La grilla está centrada en el origen, pero su tamaño dependerá de los parámetros del potencial y de los niveles de energía de interés.

Para fijar de alguna manera el tamaño de la grilla se adimensionalizaron los ejes coordenados.

### Pozo Rectangular Infinito

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |x| < a/2, |y| < b/2 \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}, \quad a, b > 0$$

↓

$$x \mapsto ax, \quad y \mapsto by$$

↓

$$\left[ - \left( \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{b^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \tilde{V}(x, y) \right] \tilde{\psi}(x, y) = \frac{2mE}{\hbar^2} \tilde{\psi}(x, y)$$

$$\tilde{V}(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |x| < 1/2, |y| < 1/2 \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

### Oscilador Armónico

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

↓

$$x \mapsto l_0 x, \quad y \mapsto l_0 y, \quad \text{con} \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

↓

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} (x^2 + y^2) \right] \tilde{\psi}(x, y) = \frac{E}{\hbar\omega} \tilde{\psi}(x, y)$$

### Pozo Gaussiano

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - V_0 e^{-\alpha(x^2+y^2)} \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

↓

$$x \mapsto \frac{x}{\sqrt{\alpha}}, \quad y \mapsto \frac{y}{\sqrt{\alpha}}$$

↓

$$\left[ -\alpha \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \widetilde{V}_0 e^{-(x^2+y^2)} \right] \widetilde{\psi}(x, y) = \frac{2mE}{\hbar^2} \widetilde{\psi}(x, y),$$

$$\widetilde{V}_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$



### Pozo Rectangular Infinito

- Grilla sobre el cuadrado  $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$
- El código pide  $a$  y  $b$ .
- Pide los pasos  $\Delta x$  y  $\Delta y$  para calcular:

$$N_x = \frac{1}{\Delta x} + 1, \quad N_y = \frac{1}{\Delta y} + 1$$

- Define un array en cada dirección.

### Oscilador Armónico y Pozo Gaussiano

Se requiere un criterio para definir la grilla.

Por la forma de los potenciales se toma un cuadrado de lado  $l$  centrado en el origen.

La función de onda decae exponencialmente en zonas clásicamente prohibidas. Si interesan estados ligados con energía  $E$  basta pedir

$$V(x_{borde}, y_{borde}) \gg E$$

para satisfacer las condiciones de contorno.

Los valores de interés  $(x_{borde}, y_{borde})$  son los que caen en las intersecciones de los ejes y los bordes.

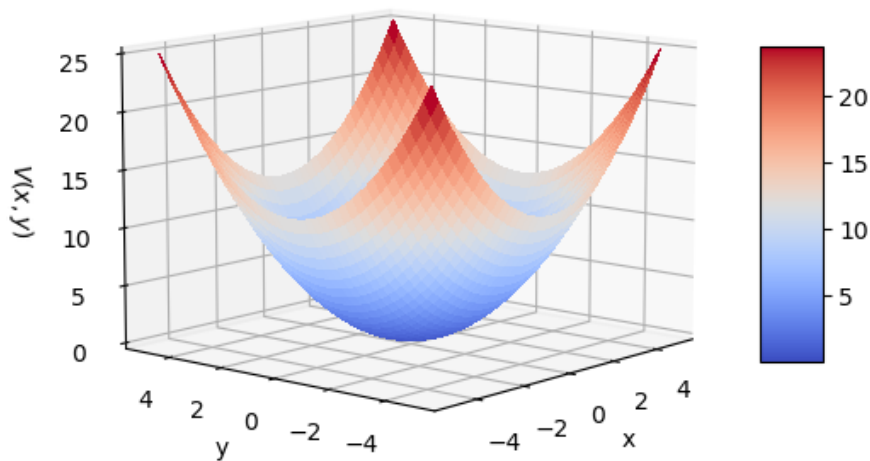


Figure: Potencial  $V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ .

### Oscilador Armónico

En este caso:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{l}{2} \right)^2 \gg E$$

Conocemos las energías:

$$E_n = n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Para los primeros 4 o 5 niveles basta con tomar:

$$l \approx 12$$

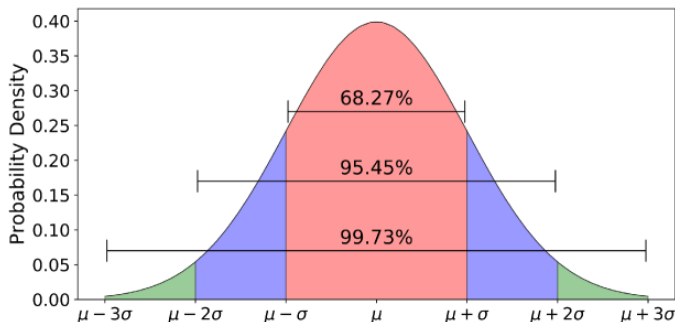
El código pide  $l$ ,  $\Delta x$  y  $\Delta y$ .

### Pozo Gaussiano

En este caso:

$$-\widetilde{V}_0 e^{-\left(\frac{I}{2}\right)^2} \gg E$$

Como no hay solución analítica, se formuló un criterio basado en la regla 68-95-99.7 para distribuciones normales.



## Implementación - Selección de la Grilla

---

Se define un parámetro

$$\varsigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

y se propone

$$\frac{l}{2} \approx 5\varsigma, 6\varsigma \implies l^{(GW)} \approx 8$$

El código pide  $\widetilde{V}_0$ ,  $l$ ,  $\Delta x$  y  $\Delta y$ .

Para ambos potenciales se calcula

$$N_x = \frac{l}{\Delta x} + 1, \quad N_y = \frac{l}{\Delta y} + 1$$

y se definen arrays en cada dirección.

### Matriz del Hamiltoniano y Algoritmo de Lanczos

La adimensionalización hace que los parámetros  $\eta$  y  $\mu$  dependan del potencial.

Potencial	$\eta$	$\mu$	$\nu_{ij}$
Pozo Rectangular	$\frac{1}{a^2(\Delta x)^2}$	$\frac{1}{b^2(\Delta y)^2}$	$2(\eta + \mu)$
Oscilador Armónico	$\frac{1}{2(\Delta x)^2}$	$\frac{1}{2(\Delta y)^2}$	$2(\eta + \mu) + \frac{1}{2}(x_i^2 + y_j^2)$
Pozo Gaussiano	$\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}$	$\frac{\alpha}{(\Delta y)^2}$	$2(\eta + \mu) - \tilde{V}_0 e^{-(x_i^2 + y_j^2)}$

El algoritmo de Lanczos no requiere  $H$ , sino una función que calcule  $H\psi$ .

Se trató de implementar el algoritmo usando

$$[H\psi]_k = -\mu\psi_{k-(N_x-2)} - \eta\psi_{k-1} + \nu_{i,j}\psi_k - \eta\psi_{k+1} - \mu\psi_{k+(N_x-2)},$$
$$k = 0, 1, \dots, (N_x - 2)(N_y - 2) - 1.$$

pero no se logró convergencia.

Se recurrió al modulo `sparse` de la librería *SciPy*, que deja inicializar matrices dispersas especificando, en forma de arrays, las diagonales no nulas.



### Notas sobre convergencia:

- Si el vector  $q_1$  es ortogonal a algún autovector de  $H$ , el algoritmo nunca converge al correspondiente autovector. Si es casi ortogonal, la convergencia a ese autovalor puede requerir un gran número de iteraciones. Solución:  $q_1$  se toma aleatoriamente.
- Si  $H$  tiene autovalores degenerados, nunca se obtienen autovalores con su degeneración correspondiente con el algoritmo de Lanczos. Siempre se obtiene una sola copia de los autovalores. Esto es porque  $T_k$  solo admite autovalores simples.
- La ortogonalidad entre vectores de Lanczos se pierde. Esto hace que más de un autovalor de  $T_k$  aproxime un único autovalor de  $H$ .

## Resultados

---

$l$	$\varepsilon_0$	$\varepsilon_1$	$\varepsilon_2$	$\varepsilon_3$	$\varepsilon_4$	$\dim(H)$
4	1.0743	2.2990	3.9237	6.0809	8.9303	1521
6	1.0001	2.0046	3.0368	4.1395	5.4373	3481
8	0.9993	1.9981	2.9958	3.9939	4.9951	6241
10	0.9993	1.9981	2.9956	3.9924	4.9880	9801
12	0.9993	1.9981	2.9956	3.9918	4.9868	14161
14	0.9993	1.9981	2.9956	3.9918	4.9868	19321
16	0.9993	1.9981	2.9956	3.9918	4.9868	25281
Exacto	1	2	3	4	5	-

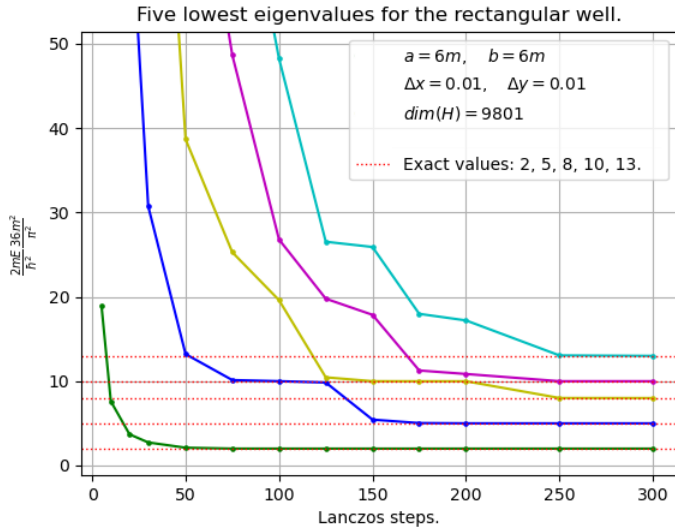
Table: Oscilador Armónico,  $\Delta x = \Delta y = 0.1$  y  $\hbar\omega\varepsilon_n = E_n$ .

## Resultados

---

$\Delta x$	$\Delta y$	$\varepsilon_0$	$\varepsilon_1$	$\varepsilon_2$	$\varepsilon_3$	$\varepsilon_4$	$\dim(H)$
0.5	0.5	0.9841	1.9518	2.8856	3.7835	4.6429	529
0.25	0.25	0.9960	1.9882	2.9723	3.9484	4.9164	2209
0.1	0.1	0.9993	1.9981	2.9956	3.9918	4.9868	14161
0.05	0.05	0.9998	1.9995	2.9989	3.9979	4.9976	57121
0.01	0.01	0.9999	1.9999	2.9999	3.9999	4.9998	1437601
0.5	0.01	0.9917	1.9594	2.8932	3.7912	4.6505	2737
0.25	0.05	0.9979	1.9900	2.9742	3.9503	4.9183	11233
0.1	0.01	0.9996	1.9984	2.9959	3.9921	4.9871	142681
Valor	Exacto	1	2	3	4	5	-

Table: Oscilador Armónico,  $l = 12$  y  $\hbar\omega\varepsilon_n = E_n$ .



## Resultados

---

$\dim(H)$	Iteraciones	$\varepsilon_0$	$\varepsilon_1$	$\varepsilon_2$	$\varepsilon_3$	$\varepsilon_4$
361	$\sim 60$	1.9958	4.9651	7.9344	9.8326	12.8018
1521	$\sim 120$	1.9989	4.9912	7.9835	9.9579	12.9502
9801	$\sim 275$	1.9998	4.9986	7.9973	9.9932	12.9920
39601	$\sim 625$	1.9999	4.9996	7.9993	9.9983	12.99805
249001	$\sim 1600$	1.9999	4.9999	7.9998	9.9997	12.9997
Exacto	-	2	5	8	10	13

Table: Pozo Rectangular,  $a = b = 6\text{m}$ , para diferentes valores de  $\Delta x = \Delta y$  con  $(\pi^2/36\text{m}^2)\varepsilon_n = 2mE_n/\hbar^2$ . Comparación entre  $\dim(H)$  y el numero de iteraciones hasta alcanzar convergencia.

## Resultados

---

$\Delta x$	$\Delta y$	$\dim(H)$	$\varepsilon_0$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_1$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_2$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_3$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_4$ [m <sup>-2</sup> ]
0.01	0.01	9801	1.2979	1.9019	2.9079	4.3150	4.5864
0.005	0.005	39601	1.2980	1.9022	2.9090	4.3182	4.5875
0.01	0.005	19701	1.2980	1.9020	2.9080	4.3150	4.5875
0.005	0.01	19701	1.2979	1.9021	2.9089	4.3182	4.5864
Valor	Exacto	-	1.2980	1.9023	2.9094	4.3193	4.5879

Table: Pozo Rectangular,  $a = 7\text{m}$ ,  $b = 3\text{m}$ , para diferentes valores de  $\Delta x$  y  $\Delta y$  con  $\varepsilon_n = 2mE_n/\hbar^2$ .

## Resultados

---

$\tilde{V}_0$ [m <sup>-2</sup> ]	$\alpha$ [m <sup>-2</sup> ]	$\Delta x = \Delta y$	Niveles	$\varepsilon_0$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_1$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_2$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_3$ [m <sup>-2</sup> ]	$\varepsilon_4$ [m <sup>-2</sup> ]
2	1	0.05	1	-0.19783	-	-	-	-
5	1	0.05	1	-1.58103	-	-	-	-
7	1	0.05	1	-2.75629	-	-	-	-
10	1	0.05	2	-4.71721	-0.78366	-	-	-
15	1	0.05	3	-8.28998	-2.82822	-0.17451	-	-
7	0.2	0.05	5	-4.83950	-2.90684	-1.45034	-1.24039	-0.34319
7	0.5	0.05	3	-3.77675	-1.18459	-0.01880	-	-
7	1	0.05	1	-2.75629	-	-	-	-
7	2	0.03	1	-1.57426	-	-	-	-
7	5	0.05	1	-0.38678	-	-	-	-

Table: Pozo Gaussiano, autovalores para diferentes valores de  $\tilde{V}_0 = 2mV_0/\hbar^2$  y  $\alpha$ .

## Resultados

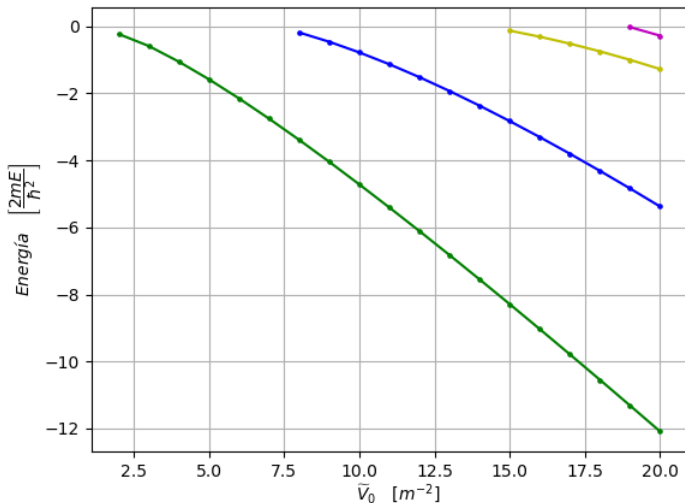


Figure: Pozo Gaussiano, autovalores como función de  $\tilde{V}_0$  con  $\alpha = 1\text{m}^{-2}$ .



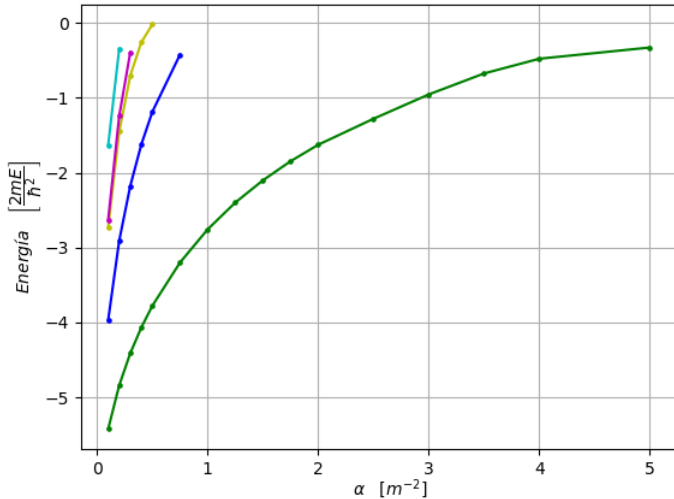


Figure: Pozo Gaussiano, autovalores como función de  $\alpha$  con  $\tilde{V}_0 = 7m^{-2}$ .

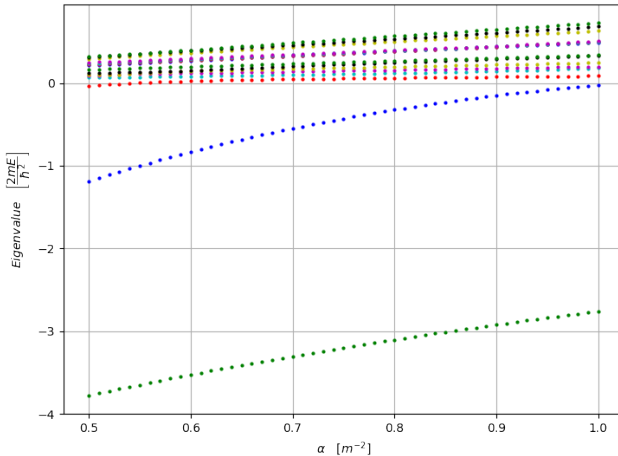


Figure: Pozo Gaussiano, primeros 15 autovalores como función de  $\alpha$  con  $\tilde{V}_0 = 7\text{m}^{-2}$  para  $l = 20$  y  $\Delta x = \Delta y = 0.05$ .

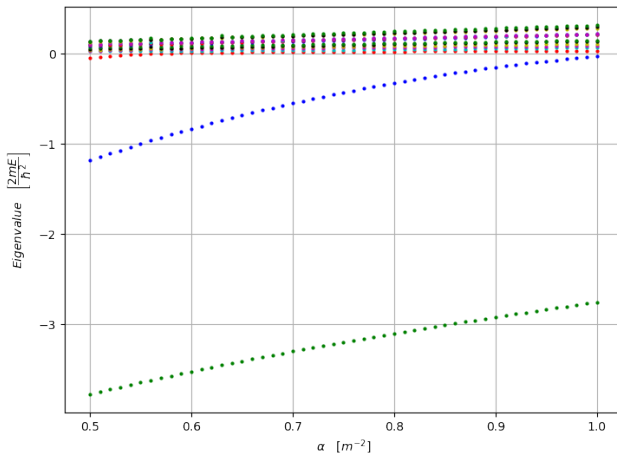


Figure: Pozo Gaussiano, primeros 15 autovalores como función de  $\alpha$  con  $\tilde{V}_0 = 7\text{m}^{-2}$  para  $l = 30$  y  $\Delta x = \Delta y = 0.05$ .

### Conclusiones:

- El método de matriz directa es apropiado para los primeros niveles de energía. La precisión y velocidad del algoritmo son mas que aceptables.
- Para niveles superiores inevitablemente se trata con matrices de tamaños muy grandes.

Mayor energía  $\iff$  Mayor tamaño de grilla

Más nodos  $\iff$  Menor paso

- El método de Lanczos funciona mas que bien, con una muy buena velocidad de cálculo.

- Una forma posible de reducir el crecimiento en tamaño de la matriz del Hamiltoniano es tomar una mejor aproximación para las derivadas segundas. Esto resulta en una matriz menos dispersa, con la ventaja de no necesitar un paso tan pequeño.

$$f''(x) = \frac{-f(x + 2\Delta x) + 16f(x + \Delta x) - 30f(x) + 16f(x - \Delta x) - f(x - 2\Delta x)}{12(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^4)$$

- Un posible paso a tomar sería la implementación de alguna variante del algoritmo de Lanczos que permita obtener los autovalores del Hamiltoniano con su multiplicidad correspondiente. (En bloques, reinicio implícito.)

Uno de los problemas que muchas variantes del algoritmo de Lanczos solucionan es la pérdida de ortogonalidad entre vectores de Lanczos. Esto se puede hacer de varias formas:

- Ortogonalización completa.
- Ortogonalización local.
- Ortogonalización selectiva.

La ortogonalización selectiva aprovecha que los vectores de Lanczos pierden su ortogonalidad de forma sistemática.

El algoritmo de Lanczos genera vectores  $q_i$  que forman una matriz  $Q$  que tridiagonaliza la matriz  $H$  del Hamiltoniano. Después de un número  $k$  de iteraciones:

$$T_k = Q_k^T H Q_k, \quad Q_k = [q_1, q_2, \dots, q_k]$$

Además:

$$T_k = V_k \Lambda_k V_k^T$$
$$V_k = [v_1^{(k)}, v_2^{(k)}, \dots, v_k^{(k)}], \quad \Lambda_k = \text{diag}(\theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)}, \dots, \theta_k^{(k)})$$

Los autovalores  $\theta_i^{(k)}$  de  $T_k$  aproximan los autovalores de  $H$  y se denominan valores de Ritz.

## Algoritmo de Lanczos - Ortogonalización Selectiva

---

Los vectores que aproximan los autovectores de  $H$  se denominan vectores de Ritz y se obtienen combinando las dos expresiones para  $T_k$ :

$$T_k = V_k \Lambda_k V_k^T = Q_k^T H Q_k \implies \Lambda_k = V_k^T Q_k^T H Q_k V_k$$

Es decir, los vectores de Ritz son las columnas de la matriz  $Q_k V_k$ :

$$Q_k V_k = [y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_k^{(k)}], \quad y_i^{(k)} = Q_k v_i^{(k)}$$

Los vectores de Lanczos comienzan a perder su ortogonalidad cuando algún valor de Ritz está por converger. Esto hace que los vectores de Lanczos subsecuentes adquieran una proyección sobre el correspondiente vector de Ritz, lo que resulta en múltiples copias del valor de Ritz.



Para monitorear la convergencia de los valores de Ritz, cuando se utiliza el algoritmo de Lanczos, se puede mostrar que el error asociado al par  $(\theta_i^{(k)}, y_i^{(k)})$  está dado por:

$$\left\| Hy_i^{(k)} - \theta_i^{(k)} y_i^{(k)} \right\| = \beta_{k+1} \left| [v_i^{(k)}]_k \right|$$

De esta forma se puede predecir cuales vectores de Lanczos tendrán proyecciones significativas sobre un vector de Ritz específico, permitiendo ortogonalizar selectivamente.

## Algoritmo de Lanczos - Ortogonalización Selectiva

---

Para cuantificar la proyección del vector de Lanczos calculado  $q_{k+1}$  sobre algún vector de Ritz  $y_i^{(k)}$  se utiliza el siguiente resultado:

$$y_i^{(k)} \cdot q_{k+1} = \frac{\mathcal{O}(\varepsilon_M \|H\|)}{\beta_{k+1} |[v_i^{(k)}]_k|}$$

donde  $\varepsilon_M = 2^{-52} \approx 2.22 \times 10^{-16}$  es el épsilon de maquina y  $\|H\|$  es la norma espectral de  $H$ . Cuando  $\theta_i^{(k)}$  converge,  $\beta_{k+1} |[v_i^{(k)}]_k| \rightarrow 0$ . Como los autovalores que convergen primero son los de los extremos del espectro, se puede aproximar

$$\|H\| \approx \|T_k\| = \max_i |\theta_i^{(k)}|$$

Basta con ortogonalizar cuando

$$\beta_{k+1} |[v_i^{(k)}]_k| \leq \sqrt{\varepsilon_M} \|T_k\|$$

Aplicando ortogonalización selectiva se encontró que:

- No tiene impacto significativo en la convergencia. Se requiere un numero apenas menor de iteraciones para lograr convergencia.
- Como hay que guardar en memoria todos los vectores de Lanczos y diagonalizar  $T_k$  en cada iteración, se pierde rapidez de forma significativa.

Entonces, no vale la pena aplicar solamente ortogonalización selectiva.