Metody numeryczne 1
Lista nr 8

1. Oblicz wartości i wektory własne macierzy

$$\begin{pmatrix} -1 & -4 & 1 \\ -1 & -2 & -5 \\ 5 & 4 & 3 \end{pmatrix}$$

2. Korzystając z modułu *Scipy* oblicz wszystkie wartości własne i wektory własne macierzy Hilberta 6×6.

3. Oblicz trzy najmniejsze wartości własne i odpowiadające im wektory własne macierzy trójdiagonalnej n× n

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

dla n=10 i 100.

4. Znajdź cztery najmniejsze wartości własne kwantowego oscylatora anharmonicznego, którego równanie Schrodingera ma postać

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{x^2}{2}+\lambda x^4\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

Wskazówka. Wprowadzając siatkę równoodległych punktów

$$x_i=-a+ih,\quad i=0,1,\dots,m;\quad h=\frac{2a}{m}$$

i zastępując drugą pochodną ψ w x_i przybliżeniem różnicy centralnej

$$\frac{d^2\psi(x_i)}{dx^2}\simeq\frac{\psi(x_{i-1})-2\psi(x_i)+\psi(x_{i+1})}{h^2}=\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{h^2}$$

oraz zakładając, że $\psi_0=\psi_m=0$ możemy równanie Schrodingera zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\psi} = E\boldsymbol{\psi}$$

gdzie

$$\boldsymbol{\psi} = \left(\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{m-1}\right)^T,$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} d_1 & g & 0 & \cdots & 0 \\ g & d_2 & g & \cdots & 0 \\ 0 & g & d_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g & d_{m-1} \end{pmatrix}$$

z

$$g = -\frac{1}{2h^2}, \quad \mathrm{d_i} = \frac{1}{h^2} + \frac{x_i^2}{2} + \lambda x_i^4$$

Oblicz wartości własne trójdiagonalnej macierzy **H** dla λ=0.2, a=4.6, m=100 i1000 . Wykreśl 4 funkcje falowe (wektory własne **H**) dla czterech najmniejszych energii własnych.