Metody numeryczne

Laboratorium 4

Wektory i własności własne

28.03.2021

Anastasiya Hradouskaya

1. Cel cwiczenia

Wyznaczenie wartości własnych macierzy trójdiagonalnej hermitowskiej metodą bisekcii

2. Opis problemu

Znaleźć rozwiązanie równania Schrodingera będącego równaniem własnym operatora energii:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = W\psi(r),$$

gdzie V(r) jest energią potencjalną, $\psi(r)$ – funkcją falową zaś E – energią odpowiadającą funckji $\psi(r)$.

Znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla cząstki o masie m umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego $V(x) = kx^2/2$.

Jeśli za jednostkę przyjąć ħω (gdzie $\omega^2 = k/m$) a jednostkę długości $\sqrt{\hbar/m\omega}$ to powyższe równanie Schrodingera przyjmuje postać:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\,\psi(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x).$$

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania ilorazem różnicowym:

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

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

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

i żądając zerowania się funckji falowej $\psi(x)$ w nieskończonościach $\psi(x = -L \to -\infty) = \psi_0 = 0$ i $\psi(x = +L \to +\infty) = \psi_n = 0$ równanie można przedstawić w postaci macierzowej jako:

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & & 0 & 0 & 00 & \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & & 0 & 0 & 00 & \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & & 0 & 0 & 00 & \\ & 0 & 0 & 00 & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 & \\ & 0 & 0 & 00 & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} & \\ & 0 & 0 & 00 & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} & \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix},$$

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

Korzystając z faktu, że macierz jest nie tylko rzeczywistą i symetryczną, ale i trójprzekątniową, znaleźć jej wektory i własności własne.

3. Opis metody

3.1 Wartości i wektory własne

Wektorem własnym macierzy kwadratowej nazywamy wektor V, który zachowuje kierunek po wykonaniu mnożenia przez tę macierz.

$$A * V = \lambda * v,$$

gdzie λ jest wartością własną macierzy A odpowiadającą wektorowi własnemu V.

Każdy wektor własny ma odpowiadającą wartość własną. Wartości własne są określone dla danej macierzy jednoznacznie.

Równainiem charakterystycznym macierzy A nazywamy równanie:

$$\det(A - \lambda * I) = p(\lambda) = 0,$$

w którym I oznacza macierz jednostkową, p jest wielomianem stopnia n zmeinnej λ.

3.2 Twierdzenie Gershgorina

Twierdzenie Gershgorina to twierdzenie, pozwalające nałożyć ograniczenia na wartości własne macierzy o współczynnikach rzeczywistych lub zespolonych i wyznaczyć przedział, w którym znajdują się wartości własne macierzy.

Każda wartość własna macierzy A leży wewnątrz lub na brzegu przynajmniej jednego z kół D(a_{ii}, R_i), gdzie D(a_{ii}, R_i) to koło domknięte o środku w a_{ii} i promieniu R_i, $R_i = \sum_{j\neq i}|a_{ij}|$.

3.3 Metoda bisekcji

Algorytm wyznacza miejsca zerowe funckji f(x) z dokładnością do pewnego ε (dokładność tą ustalamy na początku programu) w przedziale obustronnie domkniętym [a, b] przy następujących założeniach:

- Funckja f jest określona i ciągła w przedziale [a, b]

- W końcach przedziału [a, b] wartości funkcji są przeciwnych znaków.

W przedziale [a, b] funckja ma conajmniej jedno miejsce zerowe.

Wyznaczenie wartości własnych macierzy trójdiagonalnej hermitowskiej powyższą metodą:

Po zredukowaniu macierzy A do postaci:

$$J = \begin{bmatrix} \delta_1 & \bar{\Upsilon}_2 & \dots & & 0 \\ \Upsilon_2 & & \ddots & & \bar{\Upsilon}_n \\ \vdots & & & & \\ 0 & & \dots & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

chcemy znaleźć sposób na wyznaczenie wartości własnych J.

Jeśli warunek $\gamma_i \neq 0$, i = 2, ..., n to macierz jest nieredukowalna.

W przeciwnym wypadku mozna zapisac w postaci

$$J = \begin{bmatrix} J_1 & & 0 \\ & J_2 & \\ & \ddots & \\ 0 & & J_k \end{bmatrix} .$$

Macierze J_i, k = 1, ..., k są nieredukowane.

Szukamy wielomianu charakterystycznego, rozwijając wyznacznik względem kolejnych kolumn macierzy:

$$\omega_i(\lambda) = (\det(A - \lambda*I).$$

$$\omega_0 = 1,\ \omega_1 = \delta_1 - \lambda,\ ...,\ \omega_i = (\delta_i - \lambda)\ \omega_{i-1}(\lambda) - |\gamma_i{}^2|\ \omega_{i-2}(\lambda),\ i = 2, 3, ..., n$$

$$W(\lambda) = \omega_n(\lambda).$$

Do znalezienia wartości własnych wykorzystujemy metodę bisekcji.

Sposób postępowania:

- Wybieramy dowolną liczbę λ i obliczamy wartość wielomianu charakterystycznego rekurencyjnie

- Następnie korzystamy z poniższych twierdzeń:

Jeżeli:
1) $\omega_{i=0}$ dla pewnego i<n, to $\omega_{i-1}(\lambda)\ \omega_{i+1}(\lambda) < 0$

2) $\omega_n(\lambda) = \omega(\lambda)$ jest rożne od 0, to liczba zmian znaków sąsiednich liczb $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), ..., \omega_n(\lambda)$ jest równa liczbie wartości własnych macierzy J mniejszych od λ.

3) $\omega_n(\lambda) = 0$, to λ jest wartością własną macierzy J, a ponadto jest tyle wartości własnych mniejszych niż λ, ile nastąpiło zmain znaków w ciągu $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), ..., \omega_{n-1}(\lambda)$.

Liczba iteracji potrzebna do wyznaczenia $\lambda_k = \log_2 \frac{\alpha_0 - \beta_0}{\rho}$,

gdzie α_0, β_0 – przedział poszukiwań wartości własnej, ρ – dokładność wartości własnej.

Wektory własne

Znając wartość własną macierzy J wektor własny wyznaczamy według wzorów:

$$x_1 = 1,\ x_2 = \frac{\lambda - \delta_1}{\gamma_2},$$

$$x_{i+1} = \frac{(\lambda - \delta_i)x_i - \gamma_i\, x_{i-1}}{\gamma_i + 1}, \qquad i = 2, 3, ..., n-1.$$

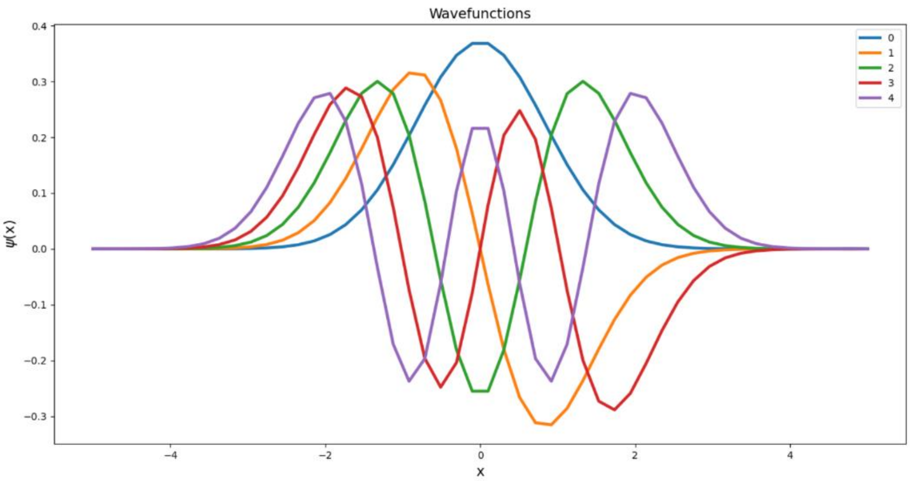
gdzie δ_i – elementy diagonalne J, γ_i – elementy pozadiagonalne J.

4. Wykresy i wyniki

W Pythonie wyliczyliśmy wartości własne i otrzymaliśmy nastepujące wyniki:

[1, 2.99252659, 4.97002002, 6.93230412. 8.87919574].

Następnie wyliczyliśmy wektory własne i wygenerowaliśmy wykresy za pomocą biblioteki matplotlib.



Rys.1 Wygenerowane funckje falowe w przedziale [-5, 5]

Powyższe wykresy zgadzają się z wynikami analitycznymi.

5. Podsumowanie

Za pomocą metody bisekcji znaleźliśmy wartości i wektory własne macierzy trójdiagonalnej hermitowskiej. Powyższa metoda służy do poszukiwania rozwiązań równania Schrodingera, co jest bardzo przydatne dla fizyków.
Metoda bisekcji jest bardzo dokładna. Wadą jest uzyskiwanie dużych wartości ciągu: $\omega_0(\lambda)$, $\omega_1(\lambda)$, ..., $\omega_n(\lambda)$, jeśli λ znacznie się różni od wartości J. Zaletą jest natomiast możliwość obliczenia wartości własnej o określonym indeksie.

Bibliografia:

http://home.agh.edu.pl/~chwiej/mn/diagonalizacja_2018.pdf

https://pl.wikipedia.org/wiki/Twierdzenie_Gerszgorina

http://home.agh.edu.pl/~dpawlus/pliki/matlab/MO_algorytmy.pdf

https://www.cce.pk.edu.pl/~michal/pdfy/Metody15.pdf