Metody numeryczne

Laboratorium 5

Rozkład QR

08.04.2021

Anastasiya Hradouskaya

1. Cel cwiczenia

Wyznaczenie wartości i wektorów własnych macierzy trójdiagonalnej hermitowskiej przy użyciu rozkładu QR.

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 $\psi_i = \psi(x_i)$

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

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 przy użyciu rozkładu QR.

3. Opis metody

Rozkład QR

Twierdzenie (Algorytm QR):

Niech A = $A_0 \in R^{N\times N}$. Niech $A_i = Q_iR_i$ będzie rozkładem QR. Wówczas iteracja

$$A_{i+1} = R_iQ_i$$

jest zbieżna do postaci trójkątnej górnej, przy czym na głównej diagonali pojawiają się wartości własne macierzy A, z ewentualnymi blokami, odpowiadającymi zespolonym lub wielokrotnym wartościom własnym macierzy A.

Proces iteracyjnego przekształcania macierzy:

A_0 = A – macierz pierwotna,

Q – macierz ortogonalna (QQ^T = I),

R – macierz trójkątna górna.

$A_i = Q_iR_i$, mnożwymy lewostronnie razy Q_i^{-1}

$Q_i^{-1}A_i = R_i$, mnożymy prawostronnie razy Q_i

$Q_i^{-1}A_iQ_i = R_iQ_i = A_{i+1} = Q_{i+1}R_{i+1}$

$Q_i^{-1}A_iQ_i = Q_{i+1}R_{i+1}$, mnożymy lewostronnie razy Q_{i+1}^{-1}

$Q_{i+1}^{-1}Q_i^{-1}A_iQ_i = R_{i+1}$, mnożymy prawostronnie razy Q_{i+1}

$Q_{i+1}^{-1}Q_i^{-1}A_iQ_iQ_{i+1} = R_{i+1}Q_{i+1} = A_{i+2}$

Cofając się wstecz do i = 0 otrzymamy:

$A_{k+1} = Q_k^{-1}Q_{k-1}^{-1} \dots Q_1^{-1}AQ_1\, Q_2 \dots Q_k$.

Dla skrócenia zapisu wprowadzimy oznaczenia:

$P = P_k = Q_1Q_2 \dots Q_k$

$P^{-1} = P_k^{-1} = Q_k^{-1}Q_{k-1}^{-1} \dots Q_1^{-1}$

Jeśli proces przekształcania macierzy doprowadzimy do końca wówczas otrzymamy

$P^{-1}AP = A_{k+1} = H$

Gdzie: macierz H jest macierzą górną-trójkątną z wartościami własnymi na diagonali:

$$\lambda_i = h_{ii}$$

Wektor własny y_k macierzy H odpowiadający wartości własnej λ wyznaczamy stosując wzory

$x_j^{(i)}$= 0, j = n, n – 1, ..., i + 1

$x_i^{(i)}$ = 1

$x_j^{(i)} = -\frac{\sum_{k=j+1}^{i} h_{jk} x_k^{(i)}}{h_{jj} - h_{ii}}$, j = i – 1, i – 2, ..., 1.

Dysponując wektorami x_k możemy wyznaczyć wektory własne y_k wyjściowego porblemu (macierz trójdiagonalna – dla oryginalnego problemu postępujemy podobnie)

$Hx = \lambda x$

$H = P^{-1}AP$

$P^{-1}APx = Hx = \lambda x$

$A(Px) = \lambda Px$

$y = Px$

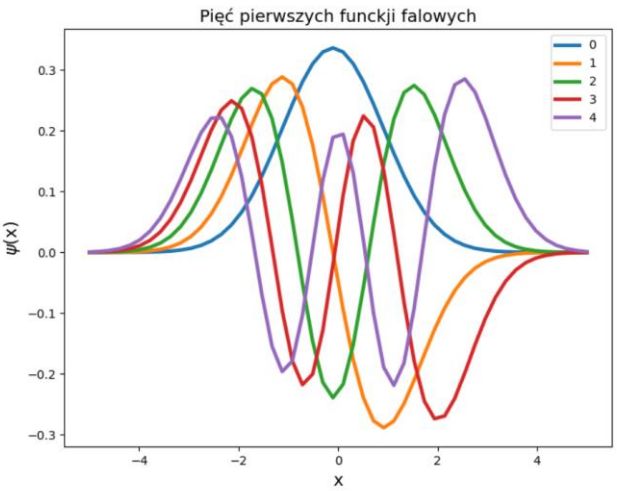
$Ay = \lambda y$

4. Wykresy i wyniki

W Pythonie wyliczyliśmy wartości własne i otrzymaliśmy nastepujące wyniki:

[0.49874685136728225, 1.4937216421178858, 2.4838260042849294, 3.4755855604424752, 4.510352177323636]

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



Rys.1 Pięć pierwszych funckji falowych na przedziale [-5, 5]

Powyższe wykresy zgadzają się z wynikami analitycznymi.

5. Podsumowanie

Przy użyciu rozkładu QR znaleźliśmy wartości i wektory własne macierzy trójdiagonalnej hermitowskiej.
Rozkład QR dla macierzy gęstych wymaga dużego nakładu obliczeniowego ~O(n^3), natomiast jest efektywny dla macierzy symetrycznych („prostą postacią" jest postać trójdiagonalna) oraz macierzy neisymetrycznych („prostą postacią" jest postać Hessenberga), ponieważ uzyskujemy go wykonując O(n) operacji.

Rozkład QR wykomujemy maksymalnie n – 1 krotnie.

Bibliografia:

http://home.agh.edu.pl/~chwiej/mn/diagonalizacja_2021.pdf

http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/metnum08/metnum03.pdf