Laboratorium 4

Wyznaczanie wektorów i wartości własnych macierzy za pomocą metody bisekcji

Bartosz Balawender

27.03.2021

1.Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia jest rozwiązanie równania Schroedingera , znalezienie wektorów i wartości własnych macierzy Hamiltonianu tego równania za pomocą metody bisekcji.

2.Opis problemu

Naszym zadaniem jest rozwiązanie równania Schroedingera ,które jest równaniem własnym operator energii i przedstawia się następująco:

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

Gdzie:

V(r) – energia potencjalna

$\psi(r)$ – funkcja falowa

E – energia odpowiadająca funkcji falowej

Dla cząstki masie m umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego: **V(x) = kx^2 / 2** będziemy szukać poziomów energii oraz odpowiadającym im funkcje falowe $\psi(r)$.

Przyjmując za jednostkę energii $h\omega$, gdzie $\boldsymbol{\omega^2} = \frac{\boldsymbol{k}}{\boldsymbol{m}}$ oraz jednostkę długości $\sqrt{\frac{\boldsymbol{h}}{\boldsymbol{m\omega}}}$ powyższe równanie przyjmuje postać:

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

Jeżeli zamienimy znajdującą się po lewej stronie równania pochodną drugiego rzędu na iloraz pochodnej ilorazu, jesteśmy w stanie zapisać nasze równanie iteracyjnie $\psi i = \psi(x_i)$ i ostatecznie przyjmuje ono postać :

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

Żądając zerowania się funkcji falowej w -∞ i +∞ , czyli jeżeli x = -L → -∞ to $\psi_0 = 0$ oraz x = L →∞ $\psi_N = 0$ możemy wówczas zapisać nasze równanie w postaci macierzowej jako:

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

Powyższa macierz jest macierzą hamiltonianiu, co oznacza , że jest ona rzeczywista, symetryczna oraz trójprzekątniowa.

Korzystając z tych własności należy znaleźć wektory i wartości własne tej macierzy. A następnie na wspólnym wykresie należy umieścić pięć pierwszych wyliczonych funkcji falowych oraz odpowiadające im energie. Funkcje falowe rysowane będą w przedziale [-L, L].

3.Opis metody

Aby rozwiązać problemu znalezienie wektorów i wartości własnych posłużyłem się metodą bisekcji. Zacząłem od ustalenia przedziału, w którym będą znajdować się szukane wartości własne [-L , L], gdzie L = 5.0 oraz rozmiar macierzy, który wynosił NxN , N=50. Następnie zainicjalizowałem trójdiagonalną macierz hermitowską zgodnie ze wzorami podanymi w opisie zadania:

$h_{i,i-1} = h_{i-1,i} = -\frac{1}{2(\Delta x)^2}$ dla $i = 2, \ldots, N-1$,

$h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + \frac{x_i^2}{2}, x_i = -L + i\Delta x$ dla $i = 1, \ldots, N-1$ oraz $\Delta x = 2L/N$.

Następnie korzystając z twierdzenia Gershgorina wyznaczyłem cały przedział, w którym będą znajdować się nasze wartości własne. Wartość lambdy początkowo ustawiłem na połowę przedziału.

Po ustaleniu początkowej wartości przedziału należy obliczyć współczynniki wielomianu charakterystycznego:

$$\omega_i(\lambda) = det(J_i - \lambda I)$$

Korzystając z faktu , że nasza macierz jest macierzą trójdiagonalną hermitowską możemy skorzystać z następujących wzorów na wielomiany charakterystyczne:

$\omega_0(\lambda) = 1$

$\omega_1(\lambda) = h_{1,1} - \lambda$

$\omega_i(\lambda) = (h_{i,i} - \lambda)\omega_{i-1}(\lambda) - |h_{i-1,i}^2|\omega_{i-2}(\lambda)$ dla i = 2,3, …, n

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

Powyższe kroki wykonujemy rekurencyjnie zmieniając przedział w następujący sposób:
Nasza lambda za każdym razem ustawiana jest na połowę przedziału . Zliczamy ile razy zmienił nam znak współczynników wielomianu. Na podstawie tej wartości decydujemy do jakiego przedziału należy nasza wartość własna. Robimy to poprzez porównanie naszej wartości własnej z numerem, dla

którego chcą ów wartość policzyć. Jeżeli ***wartosc_wlasna* ≥ *numer*** wybieramy lewy przedział [lewy_koniec , λ] , jeżeli nie to prawy : [λ , prawy_koniec]

Operację te wykonujemy aż do osiągnięcia wybranej dokładności. W moim przypadku było to 150 powtórzeń.

Dla każdej z otrzymanych wartości własnych wyznaczamy wektory zgodnie z poniższymi wzorami:

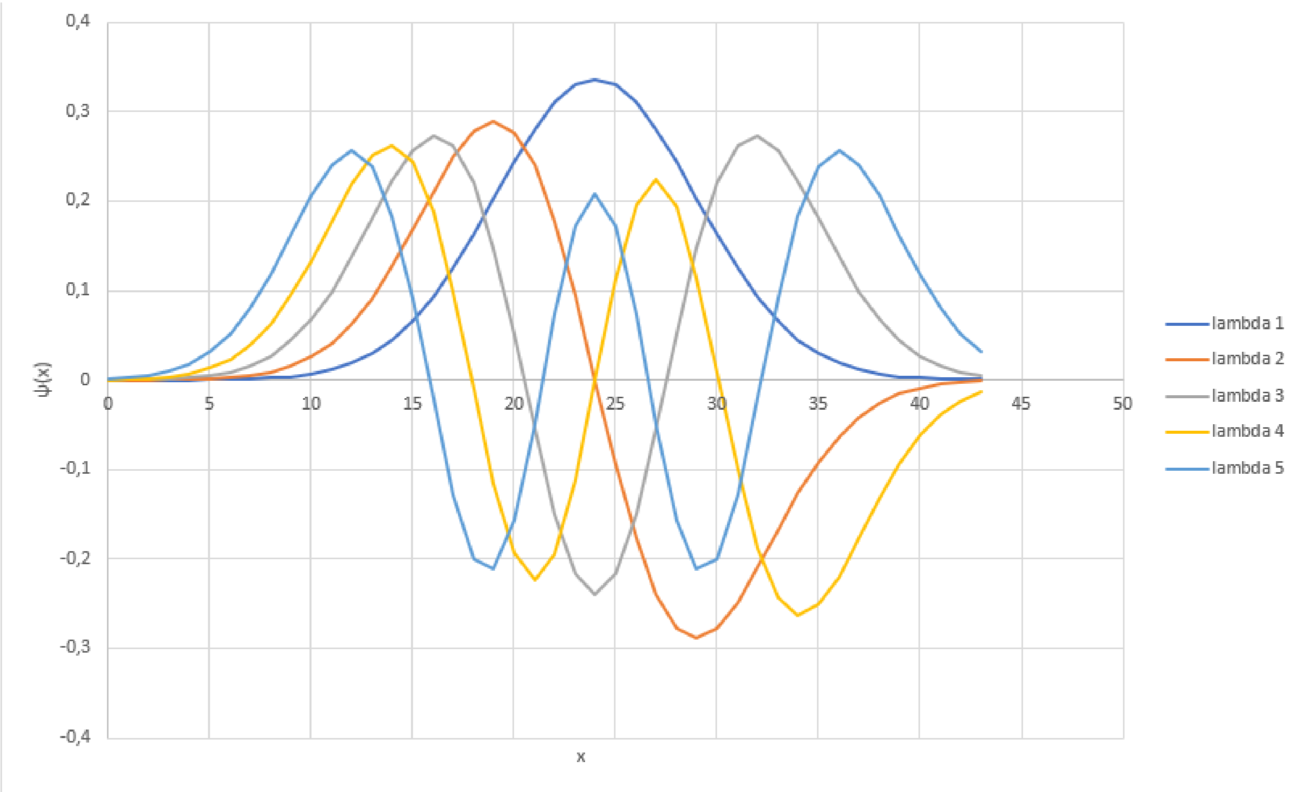
$$x_1 = 1$$

$$x_2 = \frac{\lambda - h_{11}}{h_{12}}$$

$$x_{i+1} = \frac{(\lambda - h_{ii})x_i - h_{i,i+1}x_{i-1}}{h_{i,i+1}}, \qquad i = 2, 3, \ldots, n-1$$

Gdzie x_i są kolejnymi współrzędnymi wektora własnego dla wybranej wartości własnej

4.Wyniki



Wykres 1. Wykres pięciu pierwszych funkcji falowych

Poniżej przedstawiłem otrzymane przeze mnie 5 pierwszych wartości własnych, które odpowiadają energiom pokazanych na „Wykresie 1.” funkcji falowych.

$$\lambda_1 = 0.498747$$

$$\lambda_2 = 1.49372$$

$$\lambda_3 = 2.48364$$

$$\lambda_4 = 3.46846$$

$$\lambda_5 = 4.44815$$

4.Wnioski

Otrzymane funkcje falowe oraz wartości energii zgadzają się z wynikami analitycznymi co może świadczyć o poprawności działania algorytmu.
Metoda bisekcji pozwala nam na szybkie wyznaczenie pojedynczej wybranej przez nas wartości własnej. Ponadto do zalet tej metody możemy wliczyć, że jest ona bardzo dokładna oraz nie zajmuję zbyt dużej ilości pamięci, ponieważ nie musimy operować na całej macierzy.