



Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Bartosz Rogowski, II rok, 303793

2 kwietnia 2020

Metody numeryczne

Sprawozdanie nr 4 z zajęć laboratoryjnych

Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznych metodami bezpośrednimi

1. Wstęp teoretyczny

Zjawiska fizyczne są przedstawiane za pomocą różnych modeli matematycznych, które nierzadko sprowadzają się do konieczności **znalezienia wartości i wektorów własnych** macierzy. Zadanie to nazywane jest problemem własnym macierzy A i można go zapisać w postaci:

$$(A - \lambda I)\vec{x} = 0, \quad (1)$$

gdzie $\lambda \in \mathbb{R}$, I – macierz jednostkowa.

Jeżeli macierz A jest kwadratowa i symetryczna, to wartości i wektory własne można wyznaczyć za pomocą **redukcji do rzadszych macierzy**, a następnie poddaniu ich **ortogonalizacji** (sprowadzeniu do macierzy ortogonalnej, czyli takiej, której iloczyn jej samej z jej transpozycją jest równy macierzy jednostkowej).

Trudno działać na wielkich macierzach o niezerowych elementach, dlatego w tym celu stosuje się **redukcję macierzy** gęstych do prostszych postaci, np. macierzy trójdzielnych. **Metoda Householdera** pozwala właśnie na taką operację. Polega ona na transformacji hermitowskiej¹ macierzy A do tej o żądanych właściwościach poprzez mnożenie z macierzą Householdera (ozn. P – inaczej macierz podobieństwa):

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i. \quad (2)$$

Ostatecznie po wykonaniu n takich operacji macierz A będzie wyglądała w następujący sposób:

$$A_n = \begin{bmatrix} d_1 & \bar{e}_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ e_2 & d_2 & \bar{e}_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e_3 & d_3 & \bar{e}_4 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & e_4 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \bar{e}_n \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e_n & d_n \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Metoda Householdera jest stabilna numerycznie, tzn. błędy nie kumulują się podczas obliczeń i mogą wynikać np. z danej reprezentacji liczb w komputerze. W bibliotece *Numerical Recipes*

¹ Macierz zespolona spełniająca warunek: $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$, a więc w szczególności macierz rzeczywista.

znajduje się funkcja *tred2*, która zamienia podaną macierz kwadratową **A** o wymiarze *n* (drugi argument) w macierz trójdziagonalną **T** (poniższa równość mówi o podobieństwie macierzy **A** i **T**),

$$\mathbf{T} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}, \quad (4)$$

jednak nadpisywana jest ona przez macierz podobieństwa **P**; a w kolejnych dwóch podanych argumentach (wektory zmiennoprzecinkowe \vec{d} i \vec{e}) zapisuje kolejno elementy diagonalne i poddiagonalne. Naddiagonalne elementy nie wymagają zapisu, gdyż ze względu na własność macierzy hermitowskiej, można je łatwo odtworzyć poprzez sprzężenie elementów poddiagonalnych (w przypadku rzeczywistym będą to te same wartości). Jeżeli istnieje nieosobliwa macierz **P** (jej wyznacznik jest różny od zera), to dwie macierze **A** i **T** z równania (4) są podobne i mają jednakowe wartości własne. Jeżeli macierz jest diagonalizowalna, to w szczególności dla kilku takich samych wartości własnych (inaczej: *k*-krotnych) istnieją niezależne liniowo wektory własne (innymi słowy – nie można zapisać danego wektora jako suma pomnożonych przed odpowiednie stałe pozostałych wektorów).

Diagonalizacja macierzy rzadkich wymaga znacznie mniej operacji niż gęstych. Do tego pomocna jest funkcja *tqli*, lecz jej głównym zadaniem jest rozwiązanie równania własnego dla macierzy trójdziagonalnej o rzeczywistych elementach. Przyjmuje ona wektory \vec{d} i \vec{e} (elementy należące do odpowiednich przekątnych macierzy **T**) – te, które zapisała funkcja *tred2*, rozmiar macierzy oraz macierz jednostkową² **Y**, która jest zamieniana na macierz przechowującą w kolumnach wektory własne macierzy **T**. Wówczas aby znaleźć wektory własne macierzy **A**, wystarczy wykonać mnożenie:

$$\vec{x}_k = \mathbf{P}\vec{y}_k. \quad (5)$$

W praktyce to mnożenie wykonywane jest na macierzach:

$$\mathbf{X} = \mathbf{P}\mathbf{Y},$$

X przechowuje w kolumnach wektory \vec{x}_k .

Warto zaznaczyć, że powyższa metoda daje nieuporządkowane wartości i wektory własne.

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszim zadaniem było rozwiązanie równania Schroedingera niezależnego od czasu:

$$\mathbf{H}\vec{\psi}_k = E_k\vec{\psi}_k, \quad (6)$$

gdzie E_k – całkowita energia mechaniczna cząstki, **H** – hamiltonian (inaczej: macierz operatora energii), który przedstawia się następująco (suma pochodnych cząstkowych drugiego rzędu po kolejnych współrzędnych):

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \quad (7)$$

Oznaczenia:
 \hbar – stała Diraca
m – masa cząstki

w celu obliczenia energii. Rozwiązanie równania (6) wymaga znalezienia wartości i wektorów własnych macierzy **H** w sposób opisany we wstępie. Jest nim funkcja falowa reprezentująca

² Może przyjąć również macierz **T** otrzymaną z funkcji *tred2*, wówczas nie jest konieczne znajdowanie wektorów, ponieważ są one elementami macierzy, która nadpisuje **T**.

kwantowy stan cząstki, która może być przydatna w określaniu jej pozycji w danej chwili³ (patrząc na to zagadnienie z innej perspektywy: może być to również prawdopodobieństwo znajdowania się cząstki w danym punkcie przestrzeni).

Wprowadzając siatkę węzłów $x_i = \Delta i, i = 1, \dots, n_x$ oraz $y_j = \Delta j, j = 1, \dots, n_y$, dyskretyzując równanie przez zastąpienie pochodnych odpowiednimi ilorazami (podobnie jak na poprzednich laboratoriach) oraz dokonując reindeksacji $l = j + (i - 1)n_y, l = 1, \dots, n = n_x n_y$ i przyjmując $t = -\frac{\hbar}{2m\Delta^2}$, równanie (6) przyjmuje prostszą postać:

$$\mathbf{H}\psi = t(\psi_{l-n_y} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+n_y}). \quad (8)$$

Zakładając, że $n_x = n_y$, dostajemy rzeczywistą symetryczną macierz kwadratową $\mathbf{H}_{n \times n}$, która posiada elementy niezerowe tylko na pięciu przekątnych o indeksach: $l \pm n_y, l \pm 1, l$.

Dysponując metodami *tred2* oraz *tqli* z biblioteki *Numerical Recipes*, a także przedstawionymi w tabeli 1 parametrami, poszukiwaliśmy wektorów własnych $\vec{\psi}_k$ oraz wartości własnych, które odpowiadają za ilość energii.

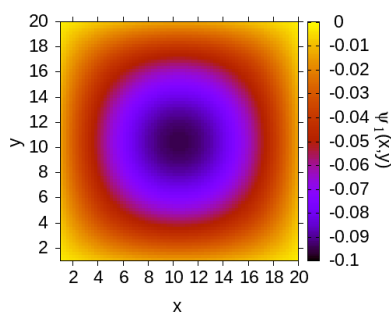
Dane:	Znaczenie:
$n_x = 20$	liczba do siatki węzłów (pozioma oś)
$n_y = 20$	liczba do siatki węzłów (pionowa oś)
$m = 10$	liczba wartości własnych, które wypisujemy
$t = -0.021$	stała (patrz: wzór (8)) której wielokrotnościami uzupełniamy \mathbf{H}

Tabela 1. Parametry podane w treści zadania

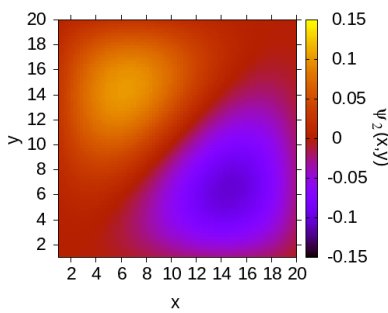
Ponieważ wartości własne (energie) nie są uporządkowane, zaimplementowano proste sortowanie.

2.2 Wyniki

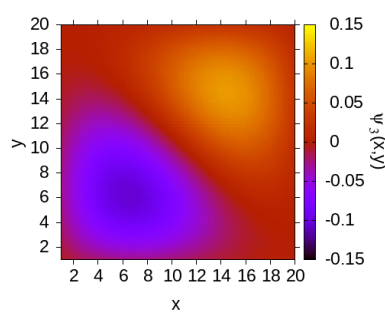
Rozwiązaniami są dwuwymiarowe funkcje falowe, które można przedstawić w postaci map (rysunki 1-10 wygenerowane za pomocą specjalnego skryptu w programie Gnuplot), w opisie znajdują się również odpowiadające im energie (10 najniższych wartości).



Rysunek 1. $\psi_1(x, y)$;
 $E = 0.000938213$

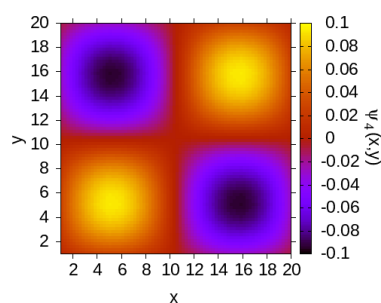


Rysunek 2. $\psi_2(x, y)$;
 $E = 0.00233504$

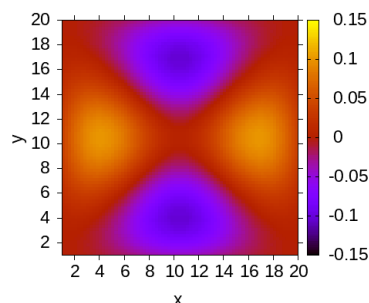


Rysunek 3. $\psi_3(x, y)$;
 $E = 0.00233512$

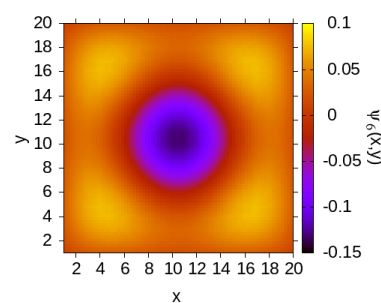
³ Źródło: <https://cnx.org/contents/u2KTPvIK@4.1:Z6RdgPXL@4/7-3-R%C3%B3wnanie-Schr%D3%A7dingera>



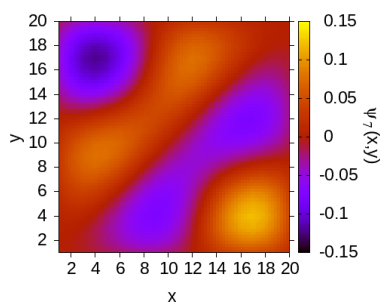
Rysunek 4. $\psi_4(x, y)$;
 $E = 0.00373193$



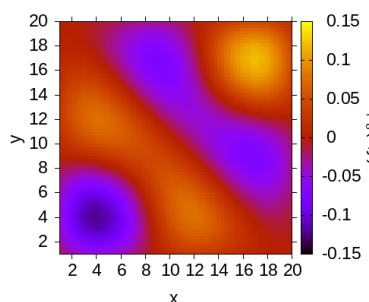
Rysunek 5. $\psi_5(x, y)$;
 $E = 0.00462838$



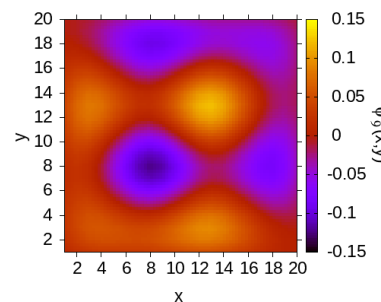
Rysunek 6. $\psi_6(x, y)$;
 $E = 0.00462851$



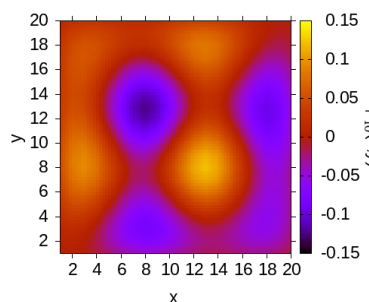
Rysunek 7. $\psi_7(x, y)$;
 $E = 0.00602518$



Rysunek 8. $\psi_8(x, y)$;
 $E = 0.00602525$



Rysunek 9. $\psi_9(x, y)$;
 $E = 0.00776708$



Rysunek 10. $\psi_{10}(x, y)$;
 $E = 0.00776711$

3. Wnioski

- Redukcja macierzy gęstych do rzadszych upraszcza wykonywanie na niej różnych działań.
- Ortogonalizacja macierzy pozwala znaleźć jej wartości i wektory własne, co często jest kluczowym zadaniem, np. w modelowaniu matematycznym.
- Ważną rolę pełni podobieństwo macierzy, ponieważ jeśli dwie macierze są podobne, to mają takie same wartości własne (a one są potrzebne do znalezienia wektorów własnych).
- Rozwiązanie równania Schroedingera niezależnego od czasu sprowadza się do znalezienia wartości i wektorów własnych macierzy operatora energii. Pozwala to wyznaczyć pozycje cząstki (lub prawdopodobieństwo jej wystąpienia) i najlepiej jest przedstawić rezultat (funkcje falowe) za pomocą wykresów – map, których to analiza jest przydatna w fizyce kwantowej.
- Dla zbliżonych wartości własnych (tu: energii) otrzymujemy podobne wykresy.