



UNIVERSIDAD DE CHILE

UNIVERSIDAD DE CHILE

FI3104-1

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA LA CIENCIA Y LA INGENIERÍA

Tarea 8 Métodos Numéricos

Autor:
Benjamín Mancilla Vera

6 de junio de 2022

Índice

Introducción	2
Pregunta 1	3
Pregunta 2	4

Introducción

El cálculo de los valores propios de una matriz es fundamental para muchos problemas físicos, por lo que muchos desarrollos se enfocan en computar estos. Para ello el método más eficaz y conocido es diagonalizando la matriz con la expresión $A = PDP^{-1}$ y obtener los valores a partir de la matriz D , la cual es una diagonal compuesta por los valores propios, cabe destacar que este método también permite calcular los vectores propios mediante la matriz P .

Por lo tanto, si se expresa un problema en términos de una matriz, los valores y vectores propios de esta entregan información de la dinámica del sistema, para entender mejor el cálculo de estos se medirá el tiempo que toma computarlos con una de las librerías más rápidas (sin embargo no tan precisa) llamada *Numpy* con su función *linalg.eig()*. Además reduciremos un problema físico complejo expresado por una ecuación a un simple problema de valores propios mediante una matriz que exprese la dinámica del sistema, con esto se podrá graficar y estudiar la física en cuestión.

Linealmente, el par valor y el vector propio se definen como el escalar y el vector que cumplen la igualdad $Av = \lambda v$, analíticamente los valores propios cumplen que $(A - \lambda \mathbb{I}) \cdot \vec{v} = 0$, lo cual nos entrega el polinomio característico $p(x) = \det(A - \lambda \mathbb{I})$ el cual posee raíces igual a los valores propios. Con este conocimiento se procede a las preguntas.

Pregunta 1

La matriz ha estudiar tiene la siguiente forma:

$$M = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & & \\ & & & \ddots & 1 \\ 1 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Es una matriz tridiagonal pero con esquinas distintas de 0. Generalmente este tipo de matriz aparece en sistemas físicos acoplados, sin embargo, las esquinas suelen ser 0 debido a que los bordes son distintos, como un puente que se encuentra colgado entre 2 montañas. En este caso los bordes están unidos, por ejemplo un sistema de resortes acoplados que forman un círculo, esto implica que el comienzo se ve afectado directamente por el final, por ello la existencia de los 1 en $M_{1,n}$ y $M_{n,1}$.

Para diagonalizar la matriz se utiliza *linalg.eig*, ya que este método calcula los valores y vectores propios de la matriz, por ende debe diagonalizarla, a este proceso se le mide el tiempo para saber cuantos segundos toma cada matriz con cierta dimensión.

Incrementando el tamaño de la matriz con un paso igual a $N=1$ se obtiene el siguiente resultado:

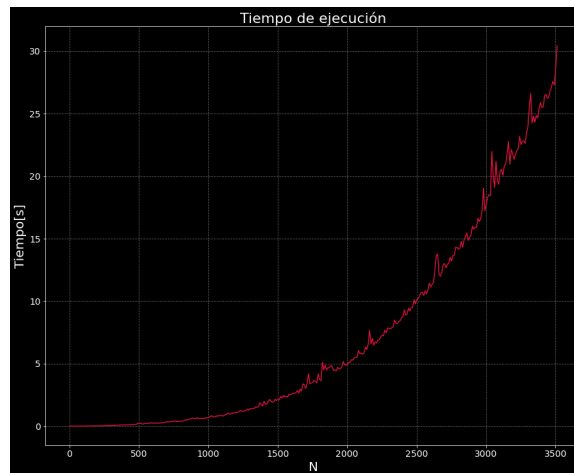


Figura 1: Tiempo vs Tamaño de la matriz

Tal como se pide, el proceso termina cuando una diagonalización toma 30 o más segundos, se aprecia que la matriz que demora esto tiene un tamaño de 3500 aproximadamente (3512 exactamente), lo cual comparado a otros computadores es bastante grande (generalmente llega entre 100 o 200).

Nótese que el comportamiento de la curva asemeja a una exponencial, esto sugiere que para números grandes una pequeña modificación del tamaño afecta mucho en el tiempo de cálculo, conociendo los límites de la máquina se procede a experimentar el tamaño de la matriz de la segunda pregunta.

Pregunta 2

Se tiene la siguiente ecuación que describe los estados cuánticos para un electrón en un movimiento 2D:

$$\epsilon g(m) = g(m+1) + g(m-1) + 2\cos(\pi m\alpha - \nu)g(m) \quad (1)$$

Notemos que $g(m)$ es nuestra incógnita y puede ser descrita por el vector $(g(m_1), g(m_2), \dots, g(m_n))^T$, esto sugiere que la matriz \hat{H} que describe el problema físico tiene la forma:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \beta & 1 & & & 1 \\ 1 & \beta & 1 & & \\ & 1 & \ddots & & \\ & & & \ddots & 1 \\ 1 & & & 1 & \beta \end{bmatrix}$$

Con $\beta = 2\cos(\pi m\alpha - \nu)$. Con esta matriz el problema se reduce a un cálculo de autovalores, ya que estos son la energía del electrón, que es lo que se desea computar. Para esto se implementa nuevamente *linalg.eig* e implementando un *for* para recorrer los distintos valores de ν y de α , en este caso debido a la potencia del computador se usan 10000 valores para α y 30 para ν . Por último se grafican los resultandos obteniendo una interesante imagen:

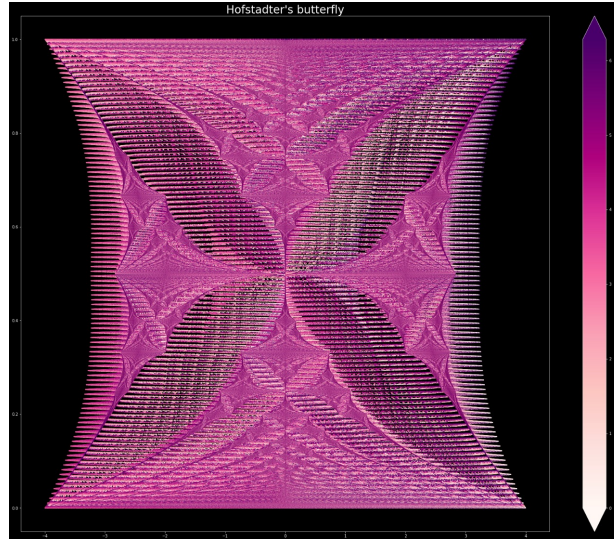


Figura 2: Energía vs Flujo)

Nótese la simetría del resultado, el comportamiento para un flujo muy alto (cerca de 1) es igual al de uno muy bajo (cerca de 0), además estos evolucionan de la misma manera cuando tienden a 0.5, esto genera un fractal con forma de mariposa. En las zonas de las alas la energía debería ser 0, sin embargo en el gráfico esto no ocurre. Esto se debe a errores de aproximación de numpy, ya que a pesar de ser muy rápido calculando valores y vectores normales, tiene un margen de error muy alto.