Sprawozdanie laboratorium metody numeryczne Lab 4 - wielomian charakterystyczny i wartości własne macierzy hamiltonianu

Jędrzej Szostak

1. Cel ćwiczenia

Nauka korzystania bisekcji i wyznaczenie przy jej pomocy wartości własnych macierzy.

2. Opis problemu

Przy użyciu bisekcji mieliśmy rozwiązać równanie Schrödingera:

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

gdzie *V(r)* - energia potencjalna, *ψ(r)* - funkcja falowa, *E* - energia odpowiadająca ψ(r).
Próbujemy znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla oscylatora harmonicznego. Wynikające z tego równania możemy przestawić macierzowo jako:

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

gdzie wzory na poszczególne elementy przedstawiają się następująco:

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

$$h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + \frac{x_i^2}{2} \qquad , gdzie\; x_i = -L + i\Delta x,\; i = 1,..., N-1$$

$$\Delta x = \frac{2L}{N}$$

Macierz hamiltonianu jest więc nie tylko rzeczywistą i symetryczną ale i trójprzekątniową.
Metoda bisekcji pomaga rozwiązywać równania macierzowe typu:

$$AX = \boldsymbol{\lambda} X \Rightarrow (A - I\boldsymbol{\lambda})X = 0$$

gdzie λ - wartości własne macierzy *A, I* - macierz jednostkowa.
Metoda ta działa, gdy macierz *A* jest trójdiagonalna i symetryczna.

3. *Opis metody*

Mając tak daną macierz:

$$J = \begin{bmatrix} \delta_1 & \bar{\gamma}_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \bar{\gamma}_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

Zaczynamy od szukania wielomianu charakterystycznego. Ze wzorów:

$$w_0(\boldsymbol{\lambda}) = 1$$

$$w_1(\boldsymbol{\lambda}) = \delta_1 - \boldsymbol{\lambda}$$

$$w_i(\boldsymbol{\lambda}) = (\delta_i - \boldsymbol{\lambda})w_{i-1}(\boldsymbol{\lambda}) - |y_i^2|w_{i-2}(\boldsymbol{\lambda})$$

$$W(\boldsymbol{\lambda}) = w_n(\boldsymbol{\lambda})$$

gdzie oznaczenia takie jak na rysunku wyżej. Następnie wybieramy dowolną liczbę $\boldsymbol{\lambda}$ i obliczamy wartość wielomianu charakterystycznego rekurencyjnie. Następnie wybieramy przedział, dla którego dokonujemy poszukiwania wartości własnych i za każdym razem go zwężamy w połowie, aż uda nam się dokładnie wyznaczyć wartości własne. W naszym algorytmie jako *N* przyjęliśmy 50, a *L=5.*

4. *Wyniki*

Wartości własne szukaliśmy w przedziale od -a do a, gdzie:

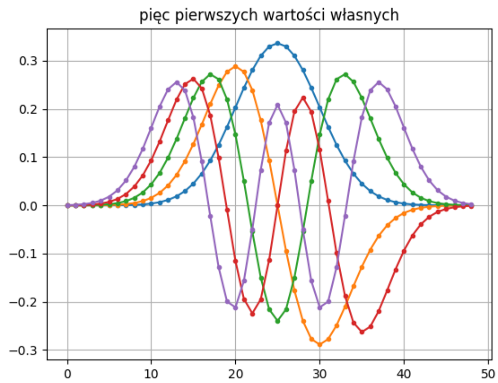
$$a = max(h_{i,i} + h_{i,i+1})$$

Obliczone pięć pierwszych wartości własne wyniosły:

1. 0.4987468673847616
2. 1.493721485789865

3. 2.483638734947891
4. 3.468460198584944
5. 4.448154937420041

Na podstawie powyższych wartości wyliczyliśmy wektory własne, korzystając z poznanej metody iteracyjnej. Funkcje falowe dla nich przedstawiają się następująco:



Wykres 1, funkcje falowe, gdzie niebieski odpowiada wartości pierwszej, pomarańczowy drugiej, zielony trzeciej, czerwony czwartej, fioletowy piątej

5. Wnioski

Metoda bisekcja działa z bardzo dużą dokładnością (pomijalnym błędem), pozwala usprawnić działanie algorytmu i wpłynąć na szybkość jego wykonywania. Jest też dobrym narzędziem sprawdzającym się w rozwiązywaniu skomplikowanych problemów takich jak ten opisany powyżej, ale też dla prostszych jak szukanie miejsc zerowych.