Sprawozdanie laboratorium metody numeryczne

Lab 5 – wielomian charakterystyczny i wartości własne macierzy hamiltonianu

Jędrzej Szostak

1. *Cel ćwiczenia*

Nauka korzystania z metody wyznaczania macierzy QR Hauseholdera i wyznaczenie przy jej pomocy wartości własnych macierzy.

2. *Opis problemu*

Przy użyciu metody QR mieliśmy rozwiązać równanie Schrodingera:

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

Gdzie *V(r)* - jest energią potencjalną, *¥(r)* - funkcją falową, zaś *E* - energią odpowiadającą funkcji *¥(r)*

Próbujemy znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla oscylatora harmonicznego.

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

Gdzie wzory na poszczególne elementy przedstawiają się następująco:

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

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

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

Macierz hamiltonianu jest więc nie tylko rzeczywistą i symetryczną, ale i trójprzekątniową.

3. *Metoda rozwiązania*

Jako warunki początkowe przyjęliśmy N = 50, L = 5. Wykorzystaliśmy do tego rozkład QR. rozkład QR to taki rozkład macierzy A, taki że A = QR, gdzie: $Q\ TQ = I$ oraz R jest macierzą trójkątną górną. Podane wyżej macierze otrzymaliśmy korzystając z transformacji Hauseholdera, czyli uzyskując macierz postaci:

$$h = I - \beta u u^H$$

A następnie wyliczamy wartości własne macierzy według wzorów:

$$A_0 = A$$
$$A_i = Q_i R_i$$
$$P = Q_1 Q_2 \dots Q_k$$
$$P^{-1} = Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} \dots Q_1^{-1}$$
$$P^{-1} A P = H$$

Gdzie H to macierz górno-trójkątna z wartościami własnymi na diagonali.

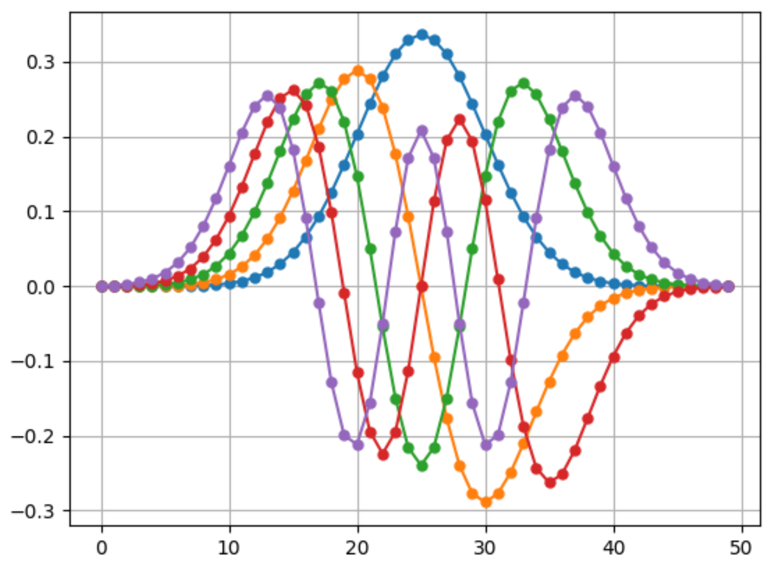
4. Wyniki

Obliczone pierwsze 5 wartości własnych w przybliżeniu przedstawia się następująco:

- 0,50
- 1,49
- 2,48
- 3,47
- 4,45

```
0.49874685  1.49372152  2.48363869  3.46845953  4.44814896
```

Otrzymaliśmy wykresy funkcji falowych dla tak obliczonych wartości własnych, które wyglądają następująco:



Rys.1 wykres funkcji falowych z przedziału [-L, L]

5. Wnioski

Metoda Hauseholdera jest stabilna numerycznie. Sprowadzając macierz do postaci trojdiagonalnej zmniejszyliśmy ilość wymaganych operacji. Metoda ta więc jest dodatkowo bardzo efektywna. Widzimy, że wykres wygląda analogicznie do tego z poprzednich laboratoriów oraz, że wartości własne w przybliżeniu się pokrywają co wskazuje na poprawne wykonanie ćwiczenia.