

# CAPÍTULO 1

Análisis Numérico

Ecuaciones diferenciales Parciales  
(PDE) y

El problema de Autovalores

- Las PDE están involucradas en la descripción de prácticamente todas las situaciones físicas en las que las cantidades varían en el espacio o en el espacio y el tiempo:

➤ Difusión

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 C(\vec{r}, t)$$

➤ electromagnetismo

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$$

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0$$

➤ Hidrodinámica

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\vec{\nabla}P + \eta \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{F}$$

➤ Mecánica cuántica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

- La mayoría de las PDE físicamente importantes son de segundo orden y se pueden clasificar en tres tipos: **parabólico, elíptico o hiperbólico**.
- Las **ecuaciones parabólicas** involucran solo derivadas de primer orden en una variable, pero tienen derivadas de segundo orden en las variables restantes

- Las **ecuaciones elípticas** implican derivadas de 2º orden en todas las variables independientes, y tienen el mismo signo cuando se les agrupan en un lado.

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r}) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}, t)$$

- Las **ecuaciones hiperbólicas** involucran segundas derivadas de signo opuesto.

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0$$

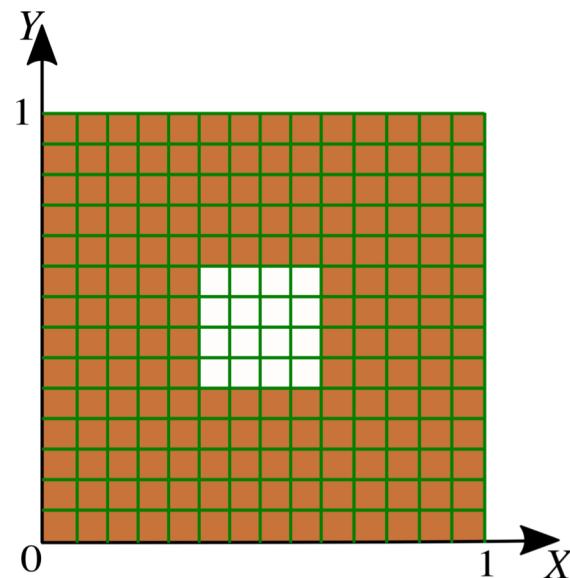
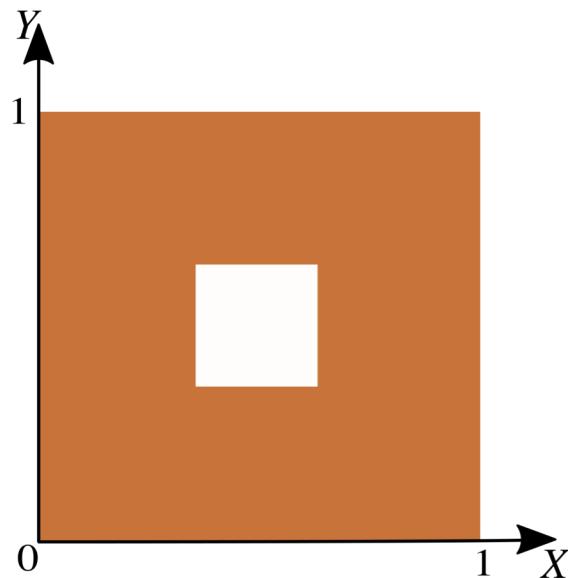
- Condiciones de frontera adecuadas son necesarias para que exista una solución única en las PDE.
- Si la condición de frontera es el valor de la solución en una superficie cerrada circundante, tenemos una **condición de frontera de Dirichlet**.
- Si la condición de frontera es el valor de la derivada normal en la superficie circundante, tenemos una **condición de frontera de Neumann**.
- Si el valor de la solución y su derivada se especifican en un límite cerrado, tenemos una **condición de frontera de Cauchy**.
- Demasiadas condiciones de frontera puede ser una especificación excesiva para la que no existe una solución.

## Discretización de las PDE

- Consideremos como ejemplo la ecuación de Poisson en 2D:

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$$

con una placa rectangular hueca y condiciones de borde de Dirichlet en los bordes externos e internos



Red  $N \times N$   
 $x_i = ih$   
 $y_j = jh$   
 $\phi_{ij} = \phi(x_i, y_j)$   
 $\rho_{ij} = \rho(x_i, y_j)$

- Definimos una red de puntos que cubre la región de interés en el plano (x, y) de ancho fijo  $h$
- Finalmente, para las derivadas usamos derivadas de elementos finitos:

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{h^2} + \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{h^2}$$

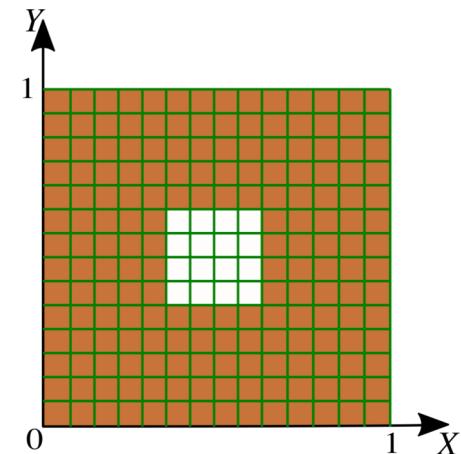
- Entonces la PDE se transforma en

$$\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j} = -4\pi h^2 \rho_{ij}$$

- Que se puede escribir en forma matricial

$$\mathcal{M}\Phi = \mathcal{S}$$

- Se puede mejorar la precisión:
  - Utilizando expresiones más exactas de la derivada en elementos finitos
  - Usando un espacio reticular no uniforme
  - Colocando más puntos en las regiones cercanas a las superficies
  - Transformando a un sistema de coordenadas en el que las condiciones de contorno se expresen de forma más natural
- En cualquier caso, las condiciones de contorno proporcionarán los valores de  $\phi_{ij}$  en algún subconjunto de puntos de la red.



## Discretización de las PDE usando el principio varacional

- Este enfoque es útil en casos donde las coordenadas no son cartesianas, o cuando se requieren fórmulas de diferencia más precisas.
- También se garantiza que conduzca a ecuaciones simétricas (o hermíticas), y ofrece una idea de cómo funciona el algoritmo.
- Definamos la cantidad  $E$ , definida como un funcional del campo  $\phi$  de la forma:

$$E = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \left[ \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 - 4\pi\rho\phi \right]$$

- Demostremos que para una solución de la PDE,  $E$  es estacionario para todas las variaciones  $\delta\phi$  que cumple las condiciones de frontera de Dirichlet impuestas:

$$\begin{aligned}\delta E &= \int_0^1 dx \int_0^1 dy [\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \delta\phi - 4\pi\rho \delta\phi] \\ &= \int_C d\vec{l} \delta\phi \hat{n} \cdot \vec{\nabla} \phi + \int_0^1 dx \int_0^1 dy \delta\phi [-\nabla^2 \phi - 4\pi\rho] \\ &= \int_0^1 dx \int_0^1 dy \delta\phi [-\nabla^2 \phi + 4\pi\rho] = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \phi + 4\pi\rho = 0\end{aligned}$$

- Para derivar una aproximación discreta a la PDE basada en este principio variacional, aproximamos  $E$  en términos de los valores del campo en los puntos de la red y luego variamos con respecto a ellos.
- La aproximación más simple a  $E$  es emplear la fórmula de diferencia de dos puntos para aproximar cada primera derivada en  $(\vec{\nabla}\phi)^2$  en los puntos medios de la red, y usar la regla rectangular para las integrales:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1,j}}{h} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}}{h} \right)^2 - 4\pi\rho_{ij}\phi_{ij} \right]$$

Poniendo

$$\frac{\partial E}{\partial \phi_{ij}} = 0 \quad \forall ij \quad E \text{ debe ser un mínimo}$$

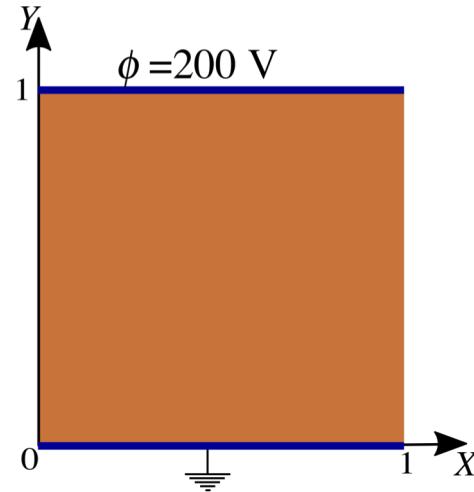


$$4\phi_{i,j} - \phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j} - \phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1} - 4\pi h^2 \rho_{ij} = 0 \quad \text{Similar a la anterior}$$

- Por supuesto, se puede obtener una discretización más precisa utilizando mejores aproximaciones para las primeras derivadas y para las integrales, teniendo cuidado de que las precisiones de ambos sean proporcionales.

## Método iterativo para resolver las PDE

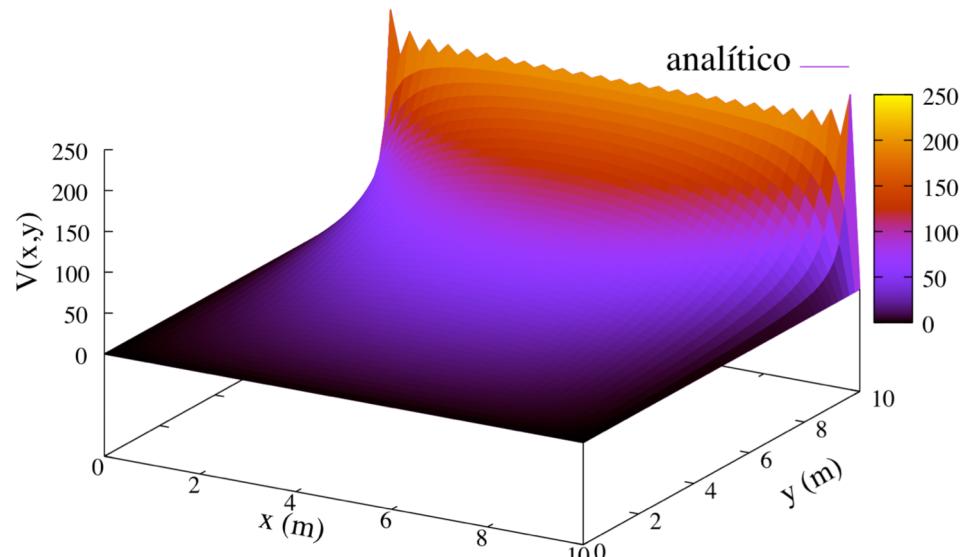
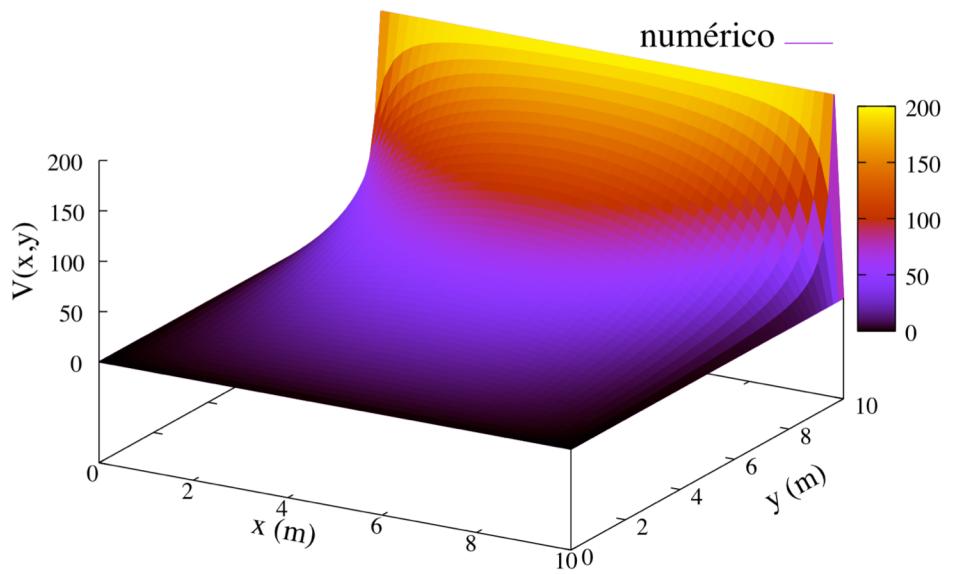
- Tomemos como ejemplo una placa cuadrada con distribución de carga uniforme  $Q = 100 \text{ C}$  puesto en un potencial de 200 V



- La ecuación sobre la red es

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) + \pi h^2 \rho_{ij}$$

- La estrategia (Gauss-Seidel) es dar una solución inicial y luego barrer sistemáticamente toda la red, reemplazando  $\phi$  en cada punto por un valor mejorado.
- Al repetir este barrido muchas veces, una suposición inicial para  $\phi$  puede "relajarse" a la solución correcta.



$$\phi(x, y) = \frac{4V_0}{\pi} \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sinh\left(\frac{n\pi y}{b}\right)}{n \sinh\left(\frac{n\pi b}{a}\right)}$$

- Investigamos la convergencia de este procedimiento para el caso unidimensional, reemplazando el nuevo  $\phi_i$  por una mezcla lineal del antiguo y el "mejorado":

$$\phi_i \rightarrow \phi'_i = (1 - \omega)\phi_i + \omega \left[ \frac{1}{4}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + \pi h^2 \rho_i \right]$$

$$\Rightarrow E' - E = -\frac{\omega(2 - \omega)}{4h} (2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i)^2$$



Así, para  $0 < \omega < 2$ , la energía siempre disminuye y por lo tanto debería converger al valor mínimo requerido a medida que avanzan los barridos.

## EL PROBLEMA DE LOS AUTOVALORES

- Las PDE como también las ecuaciones en Mecánica Cuántica se pueden resolver reduciéndolas a ecuaciones matriciales y encontrando sus autovalores.

$$\begin{aligned} \mathbb{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle & \Rightarrow \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & \ddots \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ |\psi\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle & \end{aligned}$$

## Descomposición LU de una matriz

- Queremos descomponer una matriz  $\mathbb{A}$  en una matriz triangular inferior  $\mathbb{L}$  por una matriz triangular superior  $\mathbb{U}$ :

$$\mathbb{A} = \mathbb{L}\mathbb{U}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

- Si existe la factorización  $\mathbb{L}\mathbb{U}$  ( $\det(\mathbb{A}) \neq 0$ ) , entonces la factorización es única.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

- El algoritmo para obtener  $\mathbb{L}$  y  $\mathbb{U}$  es muy simple:

$$a_{11} = u_{11}$$

$$a_{12} = u_{12}$$

$$a_{21} = l_{21}u_{11}$$

$$a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22}$$

$$a_{31} = l_{31}u_{11}$$

$$a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22}$$

$$a_{41} = l_{41}u_{11}$$

$$a_{42} = l_{41}u_{12} + l_{42}u_{22}$$

Esto resuelve todas las incógnitas. Lo mismo para las siguientes columnas.

- Cuando se pasa de la 1<sup>a</sup> a la 2<sup>a</sup> columna, no se necesita más información de los  $a_{i1}$   
 $\Rightarrow$  la matriz A se puede utilizar para almacenar los elementos de  $\mathbb{L}$  y  $\mathbb{U}$ . Esto ahorra memoria.
- El algoritmo es entonces el siguiente:

1. Elegimos  $j = 1$

2. Calculamos

$$u_{1j} = a_{1j}$$

3. Calculamos todos los elementos

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \quad i = 2, \dots, j-1$$

4. Calculamos los elementos de la diagonal

$$u_{jj} = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} u_{kj}$$

5. Calculamos para  $i > j$  los elementos

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \right)$$

6. Elegimos el siguiente  $j$  y regresamos a 2.

- Un punto crucial en la descomposición LU es cuando  $u_{jj}$  se aproxima o es igual a cero, un caso que puede conducir a pérdida de precisión o a serios problemas.

- La solución es pivotear (intercambiando filas en este caso) alrededor del elemento más grande en una columna  $j$ .
  - => En realidad descomponemos una matriz de filas permutada de la matriz original
  - => tenemos que hacer un seguimiento de todas las permutaciones realizadas.
- El programa 11\_LUdescom.f90 se utiliza como

SUBROUTINE LUdescomp(A,N,indx,d)

- **A** es la matriz que se descompone y LU se almacena en A mismo.
- **N** es el tamaño de la matriz.
- **d** es el determinante.
- **indx** contiene información del intercambio de filas; si  $\text{indx}=0$  no se intercambió; el N° almacenado se intercambió con el numero del índice, e.g.,  $\text{indx}(2)=5$  significa que las filas 2 y 5 se intercambiaron; se debe intercambiar desde el último hacia el primero para obtener el **A** original.

$$|\mathbb{A}| = |\mathbb{L}| \times |\mathbb{U}| = |\mathbb{U}| = \prod_{k=1}^N u_{kk}$$

$$\mathbb{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

## Solución de sistemas de ecuaciones lineales

- Con la descomposición LU es fácil resolver el sistema de ecuaciones

$$Ax = w$$

- En efecto, se puede resolver en dos pasos:

$$Ax \equiv LUx = w \quad \Rightarrow \quad Ly = w \quad \text{y} \quad Ux = y$$

- Dos ecuaciones que se pueden obtener por sustitución hacia adelante:

$$y_1 = \frac{w_1}{l_{11}}$$

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}} \left( w_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right) \quad i = 2, 3, \dots, N$$

Y por sustitución hacia aatrás

$$x_N = \frac{y_N}{u_{NN}}$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left( y_i - \sum_{j=i+1}^N u_{ij} x_j \right) \quad i = N-1, N-2, \dots, 1$$

12\_sistemaEcuaciones.f90

## Inversión de matrices

- Con la matriz descompuesta  $\mathbb{L}\mathbb{U}$ , la inversión de una matriz se obtiene:

$$\mathbb{A}\mathbb{A}^{-1} = \mathbb{I} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{L}\mathbb{U}\mathbb{A}^{-1} = \mathbb{I} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{A}^{-1} = \mathbb{U}^{-1}\mathbb{L}^{-1}$$

- Las inversas de matrices triangulares son también matrices triangulares, entonces:

$$\mathbb{L}\mathbb{L}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & 1 & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 1 & 0 \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow b_{ij} = -l_{ij} - \sum_{k=j+1}^{i-1} l_{ik}b_{kj} \quad i > j$$

- De la misma manera (con  $c_{ij}$  los elementos de  $\mathbb{U}^{-1}$ )

$$\Rightarrow c_{ij} = -\frac{1}{u_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} c_{ik}u_{kj} \quad i \leq j$$

13\_inversionMatriz.f90

## Solución de sistemas de ecuaciones lineales tridiagonales

- Sistemas

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

donde  $\mathbf{A}$  es una matriz tridiagonal:

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & a_{n-2} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

se pueden resolver fácilmente en dos pasos:  $a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = f_i$

btem = b(1)

u(1) = f(1)/btem

do i=2, n

    tem(i) = c(i-1)/btem

    btem = b(i) - a(i)\*tem(i)

    u(i) = (f(i) - a(i)\*u(i-1))/btem

enddo

do i=n-1, 1, -1

    u(i) = u(i) - tem(i+1)\*u(i+1)

enddo

## Ecuación de autovalores

$$\mathbb{A}X = \lambda X$$

- Sea  $\mathbb{D}$  la matriz diagonal

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

- Si  $\mathbb{A}$  es real y simétrica entonces existe una matriz real ortogonal  $\mathbb{S}$  tal que

$$\mathbb{S}^T \mathbb{A} \mathbb{S} = \mathbb{D}$$

- Para obtener los valores propios se debe realizar una serie de transformaciones de semejanza en la matriz original  $\mathbb{A}$ , para reducirla a una forma diagonal o tridiagonal.
- Decimos que una matriz  $\mathbb{B}$  es una transformada de semejanza de  $\mathbb{A}$  si

$$\mathbb{B} = \mathbb{S}^T \mathbb{A} \mathbb{S} \quad \text{donde} \quad \mathbb{S}^T \mathbb{S} = \mathbb{S}^{-1} \mathbb{S} = \mathbb{I}$$

- La importancia de una transformación de semejanza radica en el hecho de que la matriz resultante tiene los mismos valores propios y los autovectores son  $\mathbb{S}^T \mathbf{x}$

## Transformaciones de semejanza con el Método de Householder

- Queremos encontrar una matriz  $\mathbb{S}$  ortogonal que es el producto de  $n - 2$  matrices ortogonales:

$$\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 \mathbb{S}_2 \cdots \mathbb{S}_{n-2}$$

cada uno de ellos transforma sucesivamente una fila y una columna de  $\mathbb{S}_1$  en la forma tridiagonal requerida.

- Sólo se necesitan  $n - 2$  transformaciones porque los dos últimos elementos se encuentran ya en forma tridiagonal.
- Por ejemplo, si aplicamos  $\mathbb{S}_1$  tenemos

$$\mathbb{S}_1^T \mathbb{A} \mathbb{S}_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & e_1 & 0 & \cdots & 0 \\ e_1 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & \cdots & a'_{3n} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a'_{n2} & a'_{n3} & \cdots & a'_{nn} \end{pmatrix}$$

donde las cantidades primadas representan una matriz  $\mathbb{A}'$  de dimensión  $n - 1$  que será transformado por  $\mathbb{S}_2$ . El factor  $e_1$  es un elemento posiblemente no nulo.

- La siguiente transformación  $\mathbb{S}_2$  tiene el mismo efecto como  $\mathbb{S}_1$ , pero ahora solo en la sub-matriz  $\mathbb{A}'$

$$(\mathbb{S}_1 \mathbb{S}_2)^T \mathbb{A} \mathbb{S}_1 \mathbb{S}_2 = \begin{pmatrix} a_{11} & e_1 & 0 & \cdots & 0 \\ e_1 & a'_{22} & e_2 & \cdots & 0 \\ 0 & e_2 & a''_{33} & \cdots & a''_{3n} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & a''_{n3} & \cdots & a''_{nn} \end{pmatrix}$$

- Despues de una serie de tales transformaciones, terminamos con un conjunto de elementos de matriz diagonales

$$a_{11}, a'_{22}, a''_{33}, \dots, a''_{nn}$$

y fuera de la diagonal

$$e_1, e_2, e_3, \dots, e_n$$

- Ilustremos el método para  $\mathbb{S}_1$  que suponemos tiene la forma

$$\mathbb{S}_1 = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \mathbb{P} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{0}^T = (0 \quad 0 \quad \dots) \text{ de dimensión } n - 1$$

$$\mathbb{P}^2 = \mathbb{I} \text{ y } \mathbb{P}^T = \mathbb{P} \text{ de dimensión } (n - 1) \times (n - 1)$$

- Una posible elección es

$$\mathbb{P} = \mathbb{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T \quad \text{con } \mathbf{u} \text{ un vector columna } n - 1 \text{ tal que } \mathbf{u}^T \mathbf{u} = 1$$

- Cada elemento de  $\mathbb{P}$  es entonces

$$P_{ij} = \delta_{ij} - 2u_i u_j \quad i, j = 1, \dots, n-1$$

- La aplicación de la transformación en  $\mathbb{S}_1$  nos da

$$\mathbb{S}_1^T \mathbb{A} \mathbb{S}_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & (\mathbb{P}\mathbf{v})^T \\ \mathbb{P}\mathbf{v} & \mathbb{A}' \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \mathbf{v}^T = (a_{21} \quad a_{31} \quad \dots \quad a_{n1})$$

$$\Rightarrow e_1 \mathbf{E}_{n-1} = \mathbb{P}\mathbf{v} = \mathbf{v} - 2\mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v}) \quad \text{con} \quad \mathbf{E}_{n-1}^T = (1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)$$

- Para obtener  $e_1$  tomamos el producto escalar de  $\mathbb{P}\mathbf{v}$  consigo mismo:

$$e_1^2 = (\mathbb{P}\mathbf{v})^T \mathbb{P}\mathbf{v} = \mathbf{v}^T \mathbb{P}^2 \mathbf{v} = \mathbf{v}^T \mathbf{v} = \sum_{i=2}^n a_{i1}^2$$

- Para obtener  $\mathbf{u}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1} &= 2\mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v}) \Rightarrow (\mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1})^T (\mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1}) = [2\mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v})]^T [2\mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v})] \\ &\Rightarrow \mathbf{v}^T \mathbf{v} + e_1^2 - 2e_1 a_{21}^2 = 4(\mathbf{u}^T \mathbf{v})^T \mathbf{u}^T \mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v}) = 4(\mathbf{u}^T \mathbf{v})^T (\mathbf{u}^T \mathbf{v}) \\ &\Rightarrow e_1^2 + e_1^2 - 2e_1 a_{21}^2 = 4(\mathbf{u}^T \mathbf{v})^2 \Rightarrow 2(\mathbf{u}^T \mathbf{v})^2 = e_1^2 - e_1 a_{21}^2 \end{aligned}$$

- Por lo tanto

$$2(\mathbf{u}^T \mathbf{v})^2 = e_1^2 - e_1 a_{21}^2$$

$$\mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1} = 2\mathbf{u}(\mathbf{u}^T \mathbf{v}) \implies \mathbf{u} = \frac{\mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1}}{2(\mathbf{u}^T \mathbf{v})} = \frac{\mathbf{v} - e_1 \mathbf{E}_{n-1}}{\sqrt{(e_1^2 - e_1 a_{21}^2)}}$$

- El signo de  $e_1$  se elige de manera que el denominador sea lo más grande posible para evitar pérdida de precisión.

**14\_tridiagon.f90**

## Diagonalización de una matriz tridiagonal via el algoritmo QL con desplazamientos implícitos

- Antes de discutir este algoritmo, observemos que los autovalores de una matriz tridiagonal se pueden obtener utilizando el polinomio característico

$$P(\lambda) = |\mathbb{A} - \lambda \mathbb{I}| = \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i)$$

con la matriz

$$\mathbb{A} - \lambda \mathbb{I} = \begin{pmatrix} d_1 - \lambda & e_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ e_1 & d_2 - \lambda & e_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e_2 & d_3 - \lambda & e_3 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & d_{N-2} - \lambda & e_{N-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & e_{N-1} & d_{N-1} - \lambda \end{pmatrix}$$

- Podemos resolver el problema de autovalores encontrando los ceros del polinomio de orden  $N$  en forma recursiva:

$$P_k(\lambda) = (d_k - \lambda)P_{k-1}(\lambda) - e_{k-1}^2 P_{k-2}(\lambda)$$

con

$$P_1(\lambda) = d_1 - \lambda \quad \text{y} \quad P_2(\lambda) = (d_2 - \lambda)P_1(\lambda) - e_1^2$$

- Sin embargo, para grandes matrices este algoritmo es bastante ineficiente y consume mucho tiempo.
- El algoritmo QL se basa en el método de Jacobi que consiste en una secuencia de transformaciones de similitud ortogonal, las cuales son solo rotaciones planas diseñadas para aniquilar uno de los elementos de la matriz fuera de la diagonal.
- Supongamos

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 \\ e_1 & d_2 & e_2 & 0 \\ 0 & e_2 & d_3 & e_3 \\ 0 & 0 & e_3 & d_4 \end{pmatrix}$$

- Si cualquiera de los elementos  $e_i$  son cero, la matriz se puede separar en matrices más pequeñas antes de la diagonalización. Específicamente, si  $e_1 = 0$  entonces  $d_1$  es un autovalor.

- Ahora, introducimos por ejemplo la transformación

$$\mathbb{S}_{14} = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbb{S}_{14}^T \mathbb{A} \mathbb{S}_{14} = \mathbb{A}' = \begin{pmatrix} d'_1 & e'_1 & 0 & 0 \\ e'_1 & d_2 & e_2 & 0 \\ 0 & e_2 & d_3 & e'_3 \\ 0 & 0 & e'_3 & d'_4 \end{pmatrix}$$

produce una matriz donde los elementos con prima han sido cambiados por la transformación, mientras que los elementos sin prima no se han modificado.

- Si ahora se elige  $\theta$  de manera que  $a'_{21} = e'_1 = 0$ , entonces tenemos un valor propio  $a'_{11} = d'_1$ .
- El algoritmo QL con desplazamientos implícitos se basa en el siguiente lema:  
si  $\mathbb{A}$  es una matriz no singular y simétrica y  $\mathbb{B} = \mathbb{Q}^T \mathbb{A} \mathbb{Q}$ , donde  $\mathbb{Q}$  es ortogonal y  $\mathbb{B}$  es tridiagonal con elementos positivos fuera de la diagonal, entonces  $\mathbb{Q}$  y  $\mathbb{B}$  están completamente determinados cuando la última fila de  $\mathbb{Q}^T$  se especifica
- Para aplicarlo en la práctica, suponga que de alguna manera se puede encontrar una matriz tridiagonal  $\mathbb{A}_s$  tal que  $\mathbb{A}_s = \mathbb{Q}^T \mathbb{A} \mathbb{S}$ , donde  $\mathbb{Q}^T$  es ortogonal y tiene la misma última fila que  $\mathbb{S}$ . Entonces  $\mathbb{Q} = \mathbb{S}$  y  $\mathbb{A}_s = \mathbb{A} - k_s \mathbb{I}$ .

- $k_s$  es el desplazamiento que se realiza a los elementos de la diagonal para que se acelere la convergencia que está determinada por la razón

$$\frac{\lambda_i - k_s}{\lambda_j - k_s}$$

- Se puede mostrar que los parámetros de la matriz de rotación son

$$c = \cos \theta = \frac{d_n - k_s}{\sqrt{e_n^2 + (d_n - k_s)^2}} \quad s = \sin \theta = \frac{-e_{n-1}}{\sqrt{e_n^2 + (d_n - k_s)^2}}$$

**15\_diagotri.f90**

### Ejemplo: Oscilador armónico

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

En unidades atómicas:

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = 2Eu(x) \quad V(x) = x^2$$

$$f'' = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^4)$$

- Definimos los valores mínimo y máximo de la posición y el número de puntos en la malla:

$$h = \frac{R_{\max} - R_{\min}}{N} \quad \Rightarrow \quad x_i = R_{\min} + ih, \quad i = 1, 2, \dots, N-1$$

$$\Rightarrow -\frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{h^2} + V_k u_k = 2E u_k$$

- Definimos los elementos diagonal y no diagonal de la matriz como

$$d_k = \frac{2}{h^2} + V_k \quad e_k = -\frac{1}{h^2}$$

$$\Rightarrow d_k u_k + e_{k-1} u_{k-1} + e_{k+1} u_{k+1} = 2E u_k$$

O sea

$$\begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ e_1 & d_2 & e_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e_2 & d_3 & e_3 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & e_{N-3} & d_{N-2} & e_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & e_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \cdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = 2E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \cdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix}$$

**16\_osciladorCuantico.f90**

- Primeros autovalores con  $R_{\min} = -10$  y  $R_{\max} = 10$ .

$$E_n = n + \frac{1}{2}$$

$N$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$
50	0.494948	1.474526	2.433112	3.369958	4.284221	5.174939
100	0.498747	1.493722	2.483639	3.468459	4.448141	5.422645
200	0.499687	1.498436	2.495931	3.492170	4.487150	5.480870
400	0.499922	1.499609	2.498984	3.498046	4.496795	5.495230
800	0.499980	1.499902	2.499746	3.499512	4.499199	5.498808

Algoritmo para aumentar la precisión:

- Se realiza una serie de diagonalizaciones de la matriz para diferentes valores de  $h$ .  
=> Se obtiene una serie de valores propios  $E(h/2^k)$  con  $k = 0, 1, 2, \dots$  => Usamos estos valores para realizar una extrapolación a  $h = 0$ .

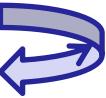
Para  $N$  iteraciones con un ajuste a un polinomio de orden  $M$ :

$N$	$M$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$
3	2	0.499987	1.49989	2.49958	3.49885	4.49752	5.49534
5	3	0.5	1.5	2.50002	3.50005	4.5001	5.5002



$$\begin{aligned}
E &= \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{h} \right)^2 - 4\pi\rho_j \phi_j \right] \Rightarrow 0 = \frac{\partial E}{\partial \phi_i} = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{1}{h^2} (\phi_j - \phi_{j-1})(\delta_{ij} - \delta_{ij-1}) - 4\pi\rho_j \delta_{ij} \right] \\
\Rightarrow 0 &= \sum_{j=1}^N [(\phi_j - \phi_{j-1})\delta_{ij} - (\phi_j - \phi_{j-1})\delta_{ij-1} - 4\pi h^2 \rho_j \delta_{ij}] = (\phi_i - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+1} - \phi_i) - 4\pi h^2 \rho_i \\
\Rightarrow 2\phi_i - \phi_{i-1} - \phi_{i+1} - 4\pi h^2 \rho_i &= 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_i = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + 2\pi h^2 \rho_i
\end{aligned}$$


---



$$\phi_i \rightarrow \phi'_i = (1 - \omega)\phi_i + \omega \left[ \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + 2\pi h^2 \rho_i \right] \quad E = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2h} (\phi_i - \phi_{i-1})^2 - 4\pi h \rho_i \phi_i \right]$$

$$\begin{aligned}
E' - E &= \frac{1}{2h} (\phi'_i - \phi_{i-1})^2 + \frac{1}{2h} (\phi'_i - \phi_{i+1})^2 - 4\pi h \rho_i \phi'_i - \frac{1}{2h} (\phi_i - \phi_{i-1})^2 - \frac{1}{2h} (\phi_i - \phi_{i+1})^2 + 4\pi h \rho_i \phi_i \\
&= \frac{1}{2h} (\phi'^2_i - 2\phi'_i \phi_{i-1} - \phi_i^2 + 2\phi_i \phi_{i-1} + \phi'^2_i - 2\phi'_i \phi_{i+1} - \phi_i^2 + 2\phi_i \phi_{i+1}) - 4\pi h \rho_i (\phi'_i - \phi_i) \\
&= (\phi'_i - \phi_i) \left[ \frac{1}{h} (\phi'_i + \phi_i - \phi_{i-1} - \phi_{i+1}) - 4\pi h \rho_i \right] = \frac{1}{h} (\phi'_i - \phi_i) [\phi'_i + \phi_i - \phi_{i-1} - \phi_{i+1} - 4\pi h^2 \rho_i]
\end{aligned}$$

$$\phi'_i - \phi_i = (1 - \omega)\phi_i + \omega \left[ \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + 2\pi h^2 \rho_i \right] - \phi_i = -\frac{1}{2} \omega [2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i]$$

$$\begin{aligned}
E' - E &= -\frac{1}{2h} \omega (2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i) \left[ (2 - \omega)\phi_i + \frac{1}{2} \omega (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + 4\pi h^2 \rho_i) - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i \right] \\
&= -\frac{1}{2h} \omega (2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i) \left[ (2 - \omega)\phi_i - \frac{1}{2} (2 - \omega)(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + 4\pi h^2 \rho_i) \right] \\
&= -\frac{1}{2h} \omega (2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i) \frac{1}{2} (2 - \omega) [2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i]
\end{aligned}$$

$$E' - E = -\frac{\omega(2 - \omega)}{4h} (2\phi_i - \phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 4\pi h^2 \rho_i)^2$$

