Sprawozdanie - laboratorium 4

Diagonalizacja macierzy operatora energii w 2D

Karolina Kotłowska, 25 marzec 2021

1 Wstęp teoretyczny

Tematem laboratorium było znalezienie numerycznego rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrodingera w dwóch wymiarach za pomocą metody Hauseholdera.

1.1 Metoda Hauseholdera

Metoda Hauseholdera jest to jedna z metod wyznaczania wartości i wektorów własnych macierzy, w której przekształcana macierz musi być macierzą hermitowską i pełną. Macierz A nazywamy hermitowską, gdy:

$$A^H = (A^T)^* \tag{1}$$

Metoda Hauseholdera pozwala na przekształcenie macierzy wyjściowej do postaci trójdiagonalnej. Kolejno w krokach iteracyjncych dokonujemy tranformacji.W każdym kroku konstruowana jest macierz P i przekształcana macierz A.

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i \tag{2}$$

W dalszych krokach, metoda Householdera dokonuje wyliczeń P_i oraz A_{i-1}. Aby uzyskać P_i używany jest następujący wzór:

$$P_i = P_I^H = P_i^{-1} = I - \beta_i \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H \tag{3}$$

Aby uzyskać A_{i-1} macierzy, wykorzystawana jest poniższa reprezentacja macierzowa:

$$A_{i-1} = \left[\begin{array}{c|c|c} J_{i-1} & c & 0 \\ \hline c^H & \delta & \boldsymbol{a}_i^H \\ \hline 0 & \boldsymbol{a}_i & \tilde{A}_{i-1} \end{array}\right] \tag{4}$$

J_{i-1} - cześć macierzy trójdiagonalnej powstała w kilu pierwszych krokach, δ - element diagonalny, c^H - wektor wierszowy, c - wektor kolumnowy, a_i - wektor kolumnowy leżący poniżej diagonali (przekształcany w taki sposób aby wyzerować wszystkie elementy poniżej pierwszej poddiagonali), $A_i - 1$ - część całkowicie nieprzekształcona (i-ty krok przekształcenia).

W kolejnym kroku należy dokonać tranformacji (n-i) elementowego wektora a_i oraz macierzy kwadratowej $\tilde{A}_{i-1}$ rzędu (n-i). Działając macierzą przekształcenia na wektor a_i chcemy dostać wersor w ukłądzie kartezjańskim.

$$\tilde{P}_i a_i = k * e_1 \tag{5}$$

Po powyższych przekształceniach, konstruujemy macierz Hauseholdera.

$$\tilde{P}_i = I - \beta \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H \tag{6}$$

gdzie współczynniki znajdujemy odpowiednio z poniższych zależności:

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{\sigma(\sigma + |\alpha_{i+1,i}|)} & \sigma \neq 0 \\ 0 & \sigma = 0 \end{cases} \tag{7}$$

$$\sigma = \|a_i\|_2 = \sqrt{\sum_{j=i+1}^{n} |\alpha_{ji}|^2} \tag{8}$$

$$k = -\sigma e^{i\varphi} \Longleftrightarrow \alpha_{i+1,i} = e^{i\varphi} \left|\alpha_{i+1,i}\right| \tag{9}$$

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\varphi}\left(\sigma + \left|\alpha_{i+1,i}\right|\right) \\ \alpha_{i+2,i} \\ \vdots \\ \alpha_{n,i} \end{bmatrix} \tag{10}$$

Gdzie wektor $\boldsymbol{u}$ - zmodyfikowany wektor $\boldsymbol{a}$ z dodatkową informacją o normie wektora (σ). Parametr β jest zwiazany z wartością pierwszego elementu wektora i normą wektora. Odpowiednio przygotowane współczynniki wstawiamy do równania na macierz Hauseholdera - równanie (6).

Ostatnim krokiem jest transformacja (działanie operatorem $\tilde{P}_i$ na elementy macierzy - na wektor kolumnowy $\boldsymbol{a}$ oraz na macierz $\tilde{A}_{i-1}$):

$$P_i^{-1} A_{i-1} P_i = P_i A_{i-1} P_i = \left[\begin{array}{c|c|c} J_{i-1} & \boldsymbol{c} & 0 \\ \hline \boldsymbol{c}^H & \delta_i & \boldsymbol{a}_i^H \tilde{P}_i \\ \hline 0 & \tilde{P}_i \boldsymbol{a}_i & \tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i \end{array}\right] \tag{11}$$

Pozostało jedynie obliczenie iloczynu macierzy $\tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i$

$$\tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i = \left(I - \beta \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H\right) \tilde{A}_{i-1} \left(I - \beta \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H\right) = \tilde{A}_{i-1} - \beta \tilde{A}_{i-1} \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H - \beta \boldsymbol{u} u^H \tilde{A}_{i-1} + \beta^2 \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H \tilde{A}_{i-1} \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^H \tag{12}$$

Aby w sposób wydajny obliczyć macierz wynikową, definiujemy dwa wektory pomocnicze $\boldsymbol{p}$ i $\boldsymbol{q}$.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p} &= \beta \tilde{A}_{i-1} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{q} &= \boldsymbol{p} - \tfrac{\beta}{2} \left(\boldsymbol{p}^H \boldsymbol{u}\right) \boldsymbol{u} \end{aligned} \tag{13}$$

Powyższe wektory są wykorzystywane w równaniu macierzowym (12) i dostajemy zredukowaną postać:

$$\begin{aligned} &\tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i = \tilde{A}_{i-1} - p u^H - u p^H + \beta u p^H u u^H \\ &= \tilde{A}_{i-1} - u \left(p - \tfrac{\beta}{2} \left(p^H u\right) u\right)^H - \left(p - \tfrac{\beta}{2} \left(p^H \boldsymbol{u}\right) \boldsymbol{u}\right) u^H \\ &= \tilde{A}_{i-1} - u q^H - q u^H \end{aligned} \tag{14}$$

Optymalizacją, którą uzyskujemy przekłada się na mniejszą liczbę operacji - rzędu n^2, zamiast n^3 (mnożenie trzech macierzy). Ostatecznie dostajemy ostajemy macierz B - macierz trójdiagonalną przekształconą metodą Hauseholdera.

$$B = A_{n-2} = \begin{bmatrix} \delta_1 & \tilde{\gamma}_2 & \cdots & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \tilde{\gamma}_n \\ 0 & \cdots & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix} \tag{15}$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Na laboratoriach zapoznaliśmy się z równaniem Schrodingera.

$$H * \psi = E * \psi \tag{16}$$

Postać operatora energii jest następująca:

$$H = -\frac{h^2}{2m} * (\frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2}) \tag{17}$$

Wprowadzamy siatkę węzłów $x_i = \Delta i, i = 1, 2, ...n_x$ oraz $y_j = \Delta j, j = 1, 2, ...n_y$. Następnie dyskretyzujemy równanie własne na siatce zastępując drugie pochodne ilorazami różnicowymi:

$$\psi(x, y) = \psi(x_i, y_j) = \psi_{i,j} \tag{18}$$

$$H\psi = E\psi \Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta^2}\right) = E\psi_{i,j} \tag{19}$$

Wprowadzony jest także współczynnik $t = -\frac{h^2}{2m\Delta^2}$ dzięki czemu równanie się upraszcza do poniższej postaci:

$$H\psi = t\left(\psi_{l-ny} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+ny}\right) \tag{20}$$

Jeśli operator H zapiszemy jako macierz kwadratową n × n to jedyne elementy niezerowe w wierszu mają postać:

$$H_{l,l\pm n_y} = H_{l,l\pm 1} = t, \quad H_{l,l} = -4t \tag{21}$$

Przyjeliśmy pewne stałe początkowe: n = $n_x * n_y$, n_x = 20, n_y = 20, m = 10, - t = -0.021

W celu rozwiązania powyżej opisanego problemu utworzyliśmy macierze $H_{nxn}, Y_{nxn}, X_{nxn}$ oraz wektory d i e o wymiarze n.
Do wypełnienia macierzy użyliśmy fragmentu kodu podanego w treści zadania, który uwzględniał liczbę sąsiadujących ze sobą węzłów w zależności od ich położenia.

Poniższa macierz jest reprezantacją dla zmniejszonego problemu do n_x=3, n_y=3

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0.084 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.021 & 0.084 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.021 & 0.084 & 0 & 0 & -0.021 & 0 & 0 & 0 \\ -0.021 & 0 & 0 & 0.084 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0 & 0 \\ 0 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0.084 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0 \\ 0 & 0 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0.084 & 0 & 0 & -0.021 \\ 0 & 0 & 0 & -0.021 & 0 & 0 & 0.084 & -0.021 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0.084 & -0.021 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.021 & 0 & -0.021 & 0.084 \end{pmatrix} \tag{22}$$

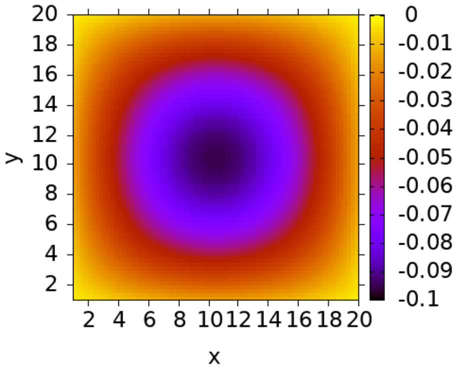
Wykorzystując funkcję tred2 pochodząca z biblioteki numerical recipes, zredukowaliśmy rzeczywistą, symetryczną macierz do postaci trójdiagonalnej, używając metody Householdera. W wyniku działania funkcji dostajemy macierz przekształcenia P, która nadpisuje macierz H.

Następnie za pomocą funkcji tqli - funkcji rozwiązującej równanie własne dla rzeczywistej, symetrycznej macierzy trójdiagonalnej, zdiagonalizowaliśmy macierz T.

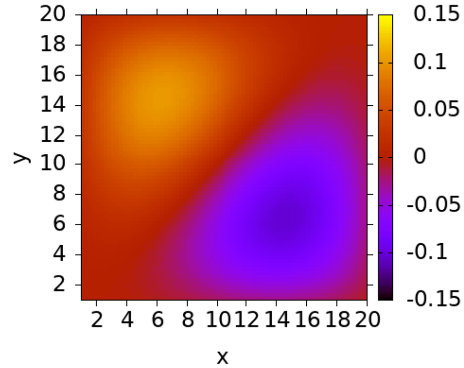
W kolejnym kroku dokonaliśmy sortowania energii za pomocą kodu podanego w treści zadania. A na koniec wyeksportowaliśmy wyniki - wektory własne - do pliku.

2.2 Wyniki

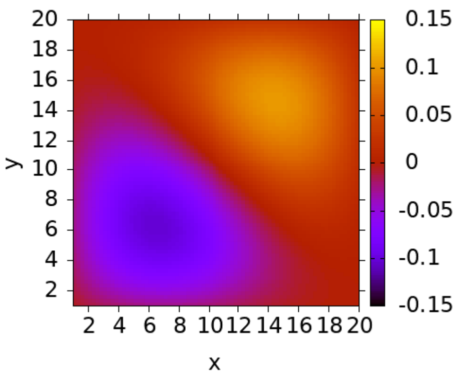
Korzystając z programu gnuplot wygenerowaliśmy wykresy dla naszych wyników. Wektory własne macierzy H odpowiadające dziesięciu najniższym wartościom własnym (funkcje falowe hamiltonanu dla cząstki w dwuwymiarowym kwadratowym pudle potencjału). W podpisach pod wykresami zamieszczono wartości własne (energie poszczególnych stanów).



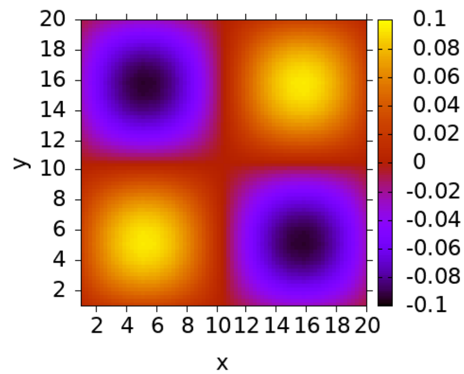
$\psi_1(x, y)$, E_1=0.000938213



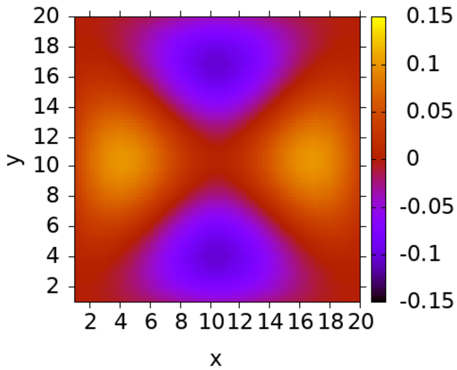
$\psi_2(x, y)$, E_2=0.00233504



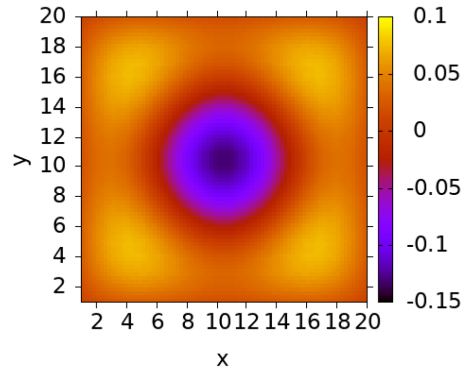
$\psi_3(x, y)$, E_3= 0.00233512



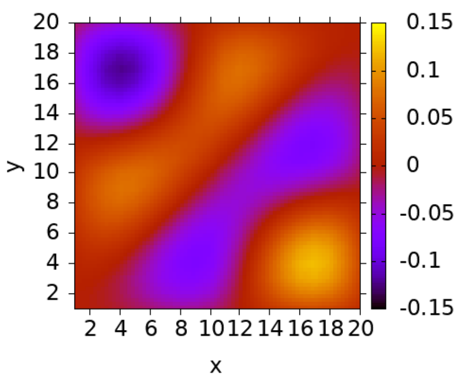
$\psi_4(x, y)$, E_4=0.00373193



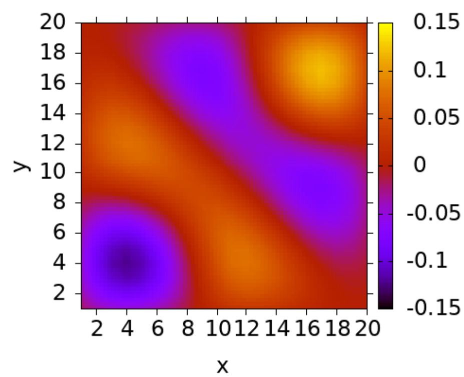
$\psi_5(x, y)$, E_5=0.00462838



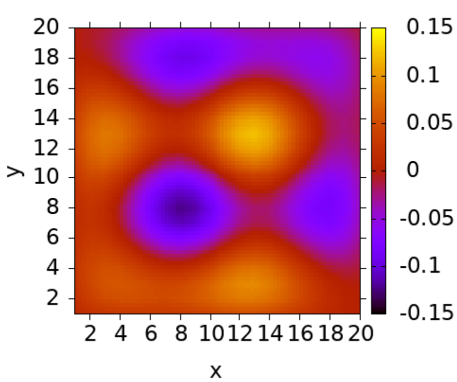
$\psi_6(x, y)$, E_6= 0.00462851



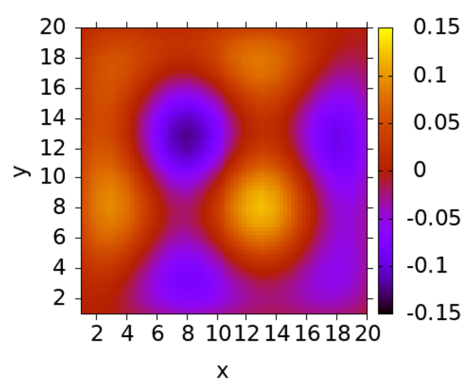
$\psi_7(x, y)$, E_7=0.00602518



$\psi_8(x, y)$, E_8=0.00602525



$\psi_9(x, y)$, E_9=0.00776708



$\psi_{10}(x, y)$, E_{10}=0.00776711

3 Wnioski

Metoda Householdera pozwoliła znaleźć macierz trójdiagonalną, dzięki której mogliśmy rozwiązać równanie własne dla rzeczywistej symetrycznej macierzy trójdiagonalnej. Użycie pomocniczych parametrów w metodzie Hauseholdera pozwala oszczędzić liczbę wykonywanych operacji. Również transformacja Hauseholdera jest z natury najprostszym z numerycznie stabilnych algorytmów. Metoda jest też mniej podatna na błędy zaokrągleń niż algorytm Grama-Schmidta.