

Sprawozdanie – laboratorium nr 4

Diagonalizacja macierzy operatora energii w 2D

Kinga Pyrek, 28.03.2020

1. Wstęp teoretyczny

Macierz diagonalna to macierz, która posiada elementy niezerowe tylko na diagonalu np. :

$$\begin{bmatrix} 25 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 18 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -21 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

Diagonalizacja polega na rozkładzie macierzy \mathbf{A} na macierze \mathbf{P} , $\mathbf{\Delta}$, \mathbf{P}^{-1} , gdzie

- $\mathbf{\Delta}$ jest macierzą diagonalną,
- \mathbf{P} jest macierzą przejścia.

Elementy macierzy $\mathbf{\Delta}$ są kolejnymi wartościami własnymi macierzy \mathbf{A} , a kolumny macierzy \mathbf{P} są kolejnymi wektorami własnymi macierzy \mathbf{A} . Macierz jest \mathbf{A} diagonalizowalna wtedy i tylko wtedy gdy posiada n liniowo niezależnych wektorów własnych.

Przy tworzeniu modeli matematycznych, które służą symulacji zjawisk fizycznych, często potrzebujemy rozwiązać tzw. problem własny (np. równanie Schrodingera):

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_k = \lambda_k \mathbf{x}_k, \text{ gdzie}$$

- \mathbf{A} to macierz kwadratowa o wymiarach $n \times n$,
- \mathbf{x}_k to wektor własny macierzy \mathbf{A} odpowiadający wartości własnej λ_k .

Liczba λ jest wartością własną macierzy \mathbf{A} , jeżeli istnieje niezerowy wektor \mathbf{x} , dla którego prawdziwe jest:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}.$$

Mówimy, że wektor \mathbf{x} jest wektorem własnym przynależnym do wartości własnej λ . Widmem macierzy nazywamy ciąg wszystkich wartości własnych macierzy \mathbf{A} i oznaczamy przez $Sp(\mathbf{A})$.

Możemy więc zapisać:

$$(A - \lambda I)x = 0,$$

gdzie I to macierz jednostkowa o wymiarze $n \times n$.

Ponieważ macierz $(A - \lambda I)$ jest macierzą osobliwą, to:

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Powyższy wyznacznik jest wielomianem stopnia n zmiennej λ .

$$w(\lambda) = \det(A - \lambda I) = (-1)^n(\lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + a_0),$$

gdzie $w(\lambda)$ to równanie charakterystyczne macierzy A .

Każda kolejna wartość własna λ_k jest pierwiastkiem wielomianu charakterystycznego macierzy A .

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Naszym zadaniem jest znalezienie numerycznego rozwiązania równania Schrodingera niezależnego od czasu w dwóch wymiarach:

$$H\psi = E\psi.$$

Operator energii ma postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right). \quad (1)$$

Wprowadzamy siatkę węzłów:

$$x_i = \Delta \cdot i, i = 1, 2, \dots, n_x$$

oraz

$$y_i = \Delta \cdot i, i = 1, 2, \dots, n_y.$$

W we wzorze (1) zastępujemy pochodne rzędu drugiego ilorazami różnicowymi, tym sposobem dyskretyzujemy równanie własne na siatce

$$\psi(x, y) = \psi(x_i, y_i) = \psi_{i,j}$$

$$H\psi = E\psi$$

⇓

$$-\frac{h^2}{2m^*} \left(\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta^2} \right) = E\psi_{i,j}.$$

Następnym krokiem jest reindeksacja :

$$l = j + (i - 1) \cdot n_y, \quad l = 1, 2, \dots, n, \text{ gdzie } n = n_x \cdot n_y$$

oraz ustalamy współczynnik $t = -\frac{h^2}{2m\Delta^2}$, dzięki czemu równanie przyjmuje postać :

$$H\psi = t(\psi_{l-n_y} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+n_y}).$$

Operator H zapisujemy jako macierz kwadratową o wymiarach $n \times n$, wtedy jedyne niezerowe elementy w danym wierszu przyjmują postać:

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

Macierz H jest pięcioprzekątniowa, a naszym celem jest jej diagonalizacja.

Aby rozwiązać zadanie przyjmujemy parametry:

- $n_x = 20$,
- $n_y = 20$,
- $n = n_x \cdot n_y = 400$,
- $m = 10$,
- $t = -0.021$.

Przekształcamy macierz H do postaci trójdzielnej $P^{-1}HP = T$ za pomocą procedury **tred2** z biblioteki *Numerical Recipes*, która dokonuje redukcji Householdera: **tred2(H, n, d, e)**, gdzie

- H to macierz układu (zostaje ona po procedurze nadpisana macierzą podobieństwa P),
- n to wymiar tej macierzy,
- d i e to wektory n- elementowe.

Zwracana jest macierz trójdzielna T, która jest zapisana w postaci wektorów d i e, gdzie d jest diagonalą, a e pierwszą poddiagonalą T.

Następnie macierz T

$$T \cdot y_k = \lambda_k \cdot y_k$$

diagonalizujemy przy użyciu procedury **tqli** z biblioteki *Numerical Recipes*: **tqli(d, e, n, Y)**, gdzie

- **d** to wektor elementów diagonalu macierzy **T**, po wykonaniu procedury zapisywane są w nim wartości własne λ_k macierzy **H** i **T**, które są takie same dla obu macierzy,
- **e** to wektor elementów macierzy **H** znajdujących się poza diagonalą, jego wartości zostają zniszczone po wykonaniu procedury,
- *n* to rozmiar macierzy,
- **Y** to macierz, którą inicjalizujemy jako macierz jednostkową, wymiaru $n \times n$, po procedurze jej kolumny przechowują wektory własne macierzy **T**.

Następnym krokiem jest odtworzenie wektorów własnych pierwotnego równania $Hx_k = \lambda_k x_k$

$$T = P^{-1}AP$$

$$Ty_k = \lambda y_k$$

$$P^{-1}APy_k = \lambda y_k$$

$$A(Py_k) = \lambda(Py_k)$$

$$Ax_k = \lambda x_k$$

$$x_k = Py_k,$$

gdzie *k* numeruje wartości i wektory własne.

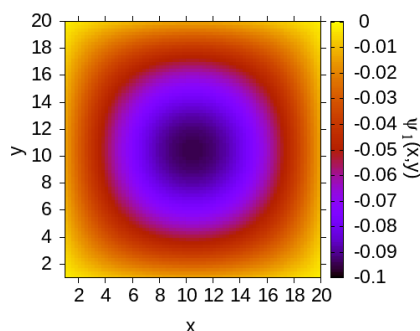
Z powyższych rozważań wynika, że wystarczy wykonać mnożenie $X=P \cdot Y$, aby otrzymać wszystkie wektory własne. **Y** to macierz, w której są zapisane własne macierzy **T**, a macierz **P** to macierz prawdopodobieństwa uzyskana po wykonaniu procedury *tred2*.

Wektory i wartości własne nie są posortowane, dlatego ostatnim krokiem jest sortowanie energii oraz indeksów wektorów, przechowanych w tablicy *indx*. Wartości własne są posortowane rosnąco w wektorze **d**, odpowiadający poszczególnym wartościom własnym, wektor własny znajduje się w macierzy **X**:

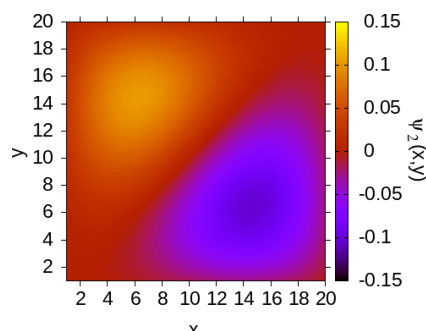
$$d[k] \rightarrow X[*][indx[k]].$$

2.2. Wyniki

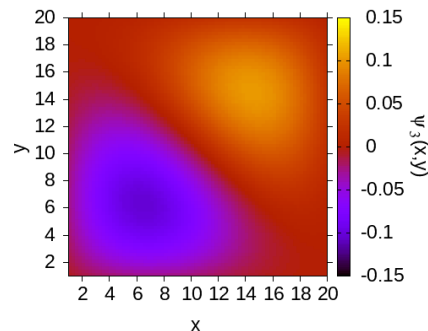
Aby zobrazować wyniki użyliśmy skryptu *gnuplot*, który wygenerował poniższe wykresy. Są na nim przedstawione wektory własne macierzy H odpowiadające dziesięciu najniższym wartościom własnym.



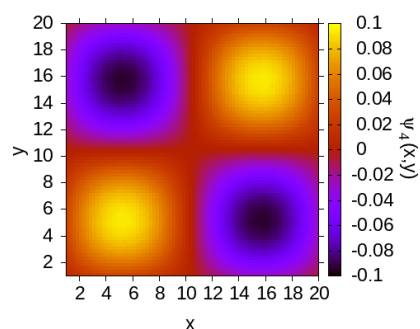
Wykres 1: $\psi(x,y)$, $E_1=0.000938213$



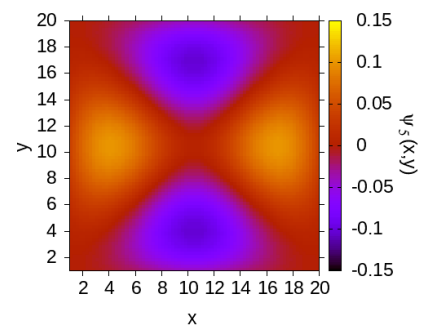
Wykres 2: $\psi(x,y)$, $E_2=0.00233504$



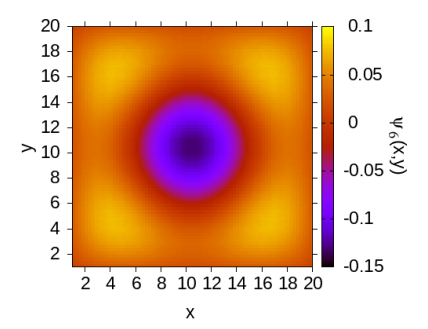
Wykres 3: $\psi(x,y)$, $E_3=0.00233512$



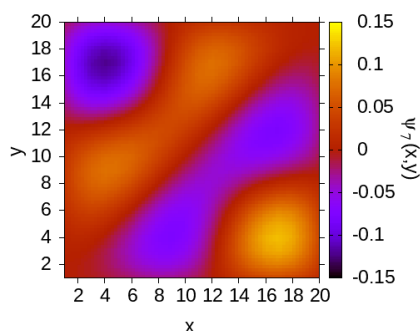
Wykres 4: $\psi(x,y)$, $E_4=0.00373193$



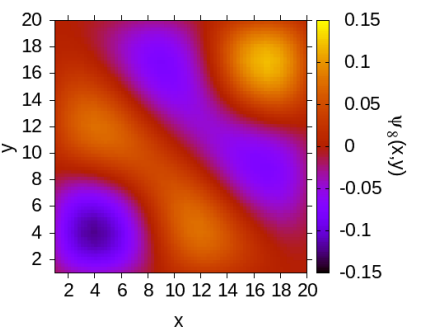
Wykres 5: $\psi(x,y)$, $E_5=0.00462838$



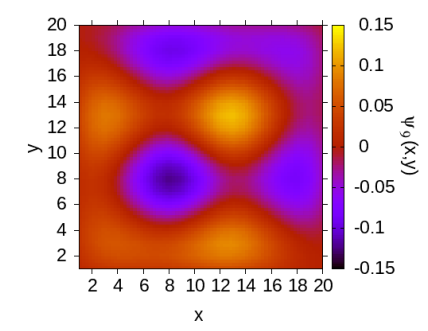
Wykres 6: $\psi(x,y)$, $E_6=0.00462851$



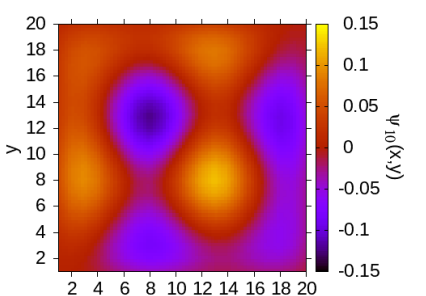
Wykres 7: $\psi(x,y)$, $E_7=0.00602518$



Wykres 8: $\psi(x,y)$, $E_8=0.00602525$



Wykres 9: $\psi(x,y)$, $E_9=0.00776708$



Wykres 10: $\psi(x,y)$, $E_{10}=0.00776711$

W podpisach E_i oznacza kolejne wartości własne- energie poszczególnym stanów. Wykresy te przedstawiają funkcje falowe hamiltonanu dla cząstki w dwuwymiarowym kwadratowym pudle potencjału (opisuje zachowanie cząstki). Możemy zauważyć, że wykresy dla prawie takich samych energii (np. wykres 2 i wykres 3) nie są identyczne, ale są podobne- obrócone.

3. Wnioski

Dzięki przydatnym funkcjom z biblioteki Numerical Recipes: ***tred2*** oraz ***tqli*** łatwo rozwiązaliśmy równanie Schrodingera, które polegało głównie na znalezieniu wektorów i wartości własnych operatora energii. Niezbędna okazała się tu diagonalizacja. Pomocne również było sprowadzenie macierzy z postaci pięciodiagonalnej do trójdziagonalnej, co znacznie ułatwiło obliczenia. Przedstawienie wyników jako funkcji falowych jest bardzo czytelne. Wyniki, które uzyskaliśmy mogą się nam wydać zaskakujące, ponieważ dla prawie takich samych energii (wartości własnych) uzyskaliśmy nieco inne wykresy, ale podobne.