# Laboratorium 5
# Metody Numeryczne
# Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
# Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Maciej Piwek

14 kwietnia 2021

## 1 Wstęp

Na laboratoriach zapoznałem się z metodą "Householdera".Na początku zajęć omówiono działanie algorytmu znanego nam z wykładu. Algorytm ten służy do rozwiązywania układów liniowych metodą QR.

## 2 Wektory i wartości własne

Wektory i wartości własne to wielkości opisujące endomorfizm danej przestrzeni liniowej. Niech $A$ będzie kwadratową macierzą $n \times n$ oraz $v$ będzie niezerowym wektorem, wtedy $v$ jest wektorem własnym przekształcenia $A$, gdy:

$$A \cdot v = \lambda \cdot v \tag{1}$$

dla pewnej liczby rzeczywistej $\lambda$, która jest wartością własną, związaną z wektorem własnym $v$.

## 3 Metoda Householdera

Zastosowano metodę Householdera, która pozwala znaleźć rozkład QR dla dowolnej macierzy prostokątnej, gdzie $(m \geq n)$. Niech $v \in R^m$ i $v \neq 0$. Wówczas transformacją Householdera nazywamy macierz postaci:

$$H = I - 2vv^T = I - 2\frac{uu^T}{u^T u} \tag{2}$$

Metodę opisuje następujący algorytm:

**Algorithm 1:** Householder triangularization

**Procedure**
- $m, n \leftarrow shape(A)$
- $R \leftarrow copy(A)$
- $Q \leftarrow I_m$
- **for** $i \leftarrow 0$ **to** *n-1* **do**
  - $v_k \leftarrow copy(R_{k:,k})$
  - $v_{k_0 0} \leftarrow v_{k_0} + sign(v_{k_0})\|v_k\|$
  - $v_k \leftarrow v_k / \|v_k\|$
  - $R_{k:,k:} \leftarrow R_{k:,k:} - 2v_k(v_k^H R_{k:,k})$
  - $Q_{k:} \leftarrow Q_{k:} - 2v_k(v_k^H Q_{k:})$
- **end**
- **return** $Q^H, R$

## 4 Wykonanie ćwiczenia

Dzięki wektorom oraz wartością własnym możemy dokonać diagonalizacji macierzy, a to może być przydatne do rozwiązywania układów równań różniczkowych. Postawiono problem poszukiwania rozwiązania równania Schrödingera, będącego równaniem własnym operatora energii:

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r) \tag{3}$$

$V(r)$ - energia potencjalna
$\psi(r)$ - funkcja falowa
$E$ - energia odpowiadająca funkcji

Jeśli za jednostkę energii przyjmiemy $h\omega(\omega^2 = \frac{k}{m})$, a jednostkę długości $'\sqrt{\frac{h}{m\omega}}$ i przekształcimy podane wyżej równanie otrzymamy równanie iteracyjne $\phi_i = \phi(x_i)$:

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\nabla x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E\psi_i \tag{4}$$

Na początku zdefiniowano macierz hamiltonianu, której jest: symetryczna, rzeczywista oraz trójprzekątniowa. Prezentuje się ona następująco:

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

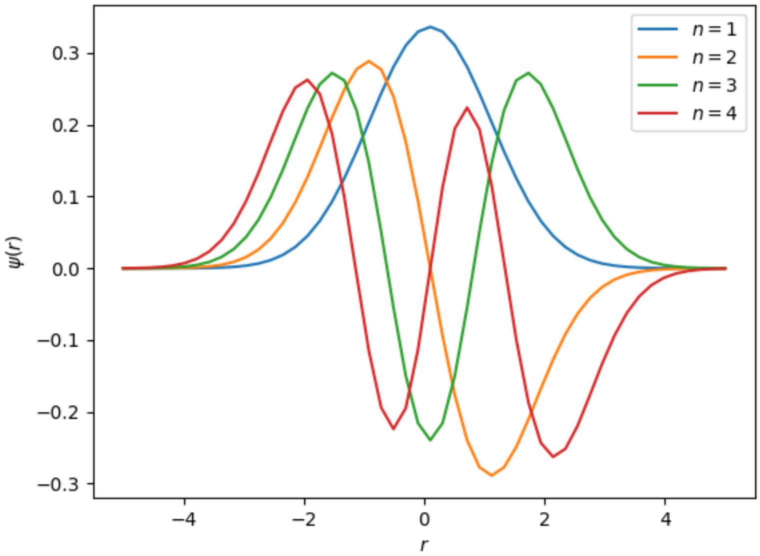
Jej wartości obliczono z podanych wzorów:

- $h_{i,i-1} = h_{i-1,i} = -1/[2(\nabla x)^2]$, dla $i = 2, \cdots, N-1$
- $h_{i,i} = (\nabla x)^{-2} + \frac{x_i^2}{2}$
- $x_i = -L + i\nabla x$, dla $i = 1, \cdots, N-1$
- $\nabla x = \frac{2L}{N}$

Uzyskana macierz jest co najważniejsze trójdiagonalnie symetryczna, a więc taka, które posiada pojedyncze wartości własne i wektory własne. Ze względu na jej postać możemy wykonać obliczenia wykonując stosunkowo niewielką liczbę działań. W ćwiczeniu przyjęto $N = 50, L = 5 \implies krok = 0,1(delta = 2 * L/N)$. Transformacja Householdera może zostać wykorzystana do przeprowadzenia rozkładu QR macierzy H. Metoda ta polega na iteracyjnym szukaniu transformacji Householdera dla kolejnych wektorów pod diagonalą macierzy H.

## 5 Wyniki

Wykres czterech pierwszych funkcji falowych dla $r$ z przedziału $r \in [-L, L]$. Dla lepszej skali wartości zostały podzielone przez normy wektorów.




Rysunek 1: Wykres funkcji falowej $\psi(r)$

## 6 Wnioski

- Dzięki metodzie Housholdera byliśmy w stanie znaleźć rozwiązanie równania Schrödingera, a następnie przedstawić wartości funkcji falowych na wykresie, co wskazuje na skuteczność wcześniej wspomnianej metody.
- Byliśmy w stanie zaimplementować metodę obliczeniową, która pomogła nam w rozwiązaniu realnego problemu z dziedziny fizyki.