

Eigenvärdesproblem för matriser och differentialekvationer

1 Inledning

Vi skall se lite på eigenvärdesproblem för matriser och differentialekvationer. I nästa läsperiod skall vi arbeta mer med eigenvärden och göra kemiprojektet "Molekylorbitaler med Hückelmetoden". Avslutningsvis ser vi lite på differentialekvationen som beskriver "partikeln i lådan".

2 Matriser

Vi skall se hur man i MATLAB löser eigenvärdesproblemet $\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ för matrisen

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 7 \\ 1 & -2 & 9 \\ 8 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

Vi beskriver matrisen och beräknar eigenvärden med

```
>> A=[5 1 7; 1 -2 9; 8 3 1];  
>> d=eig(A)  
d =  
    11.996  
   -0.6715  
   -7.3244
```

Om vi även vill ha med egenvektorerna gör vi

```
>> [V,D]=eig(A)  
V =  
   -0.66688   -0.37769   -0.22509  
   -0.43616    0.90902   -0.82741  
   -0.60418    0.17615    0.51451  
  
D =  
    11.996         0         0  
         0   -0.6715         0  
         0         0   -7.32449
```

Vi kommer då finna egenvektorerna som kolonner i matrisen V med motsvarande eigenvärden på diagonalen i diagonalmatrisen D . T.ex. tredje egenvektorn ges av $V(:,3)$ med tillhörande eigenvärde ges av $D(3,3)$.

Vi kontrollerar att $\mathbf{A}\mathbf{v}_3 = \lambda_3\mathbf{v}_3$ genom att bilda

```
>> r=A*V(:,3)-D(3,3)*V(:,3)
r =
-6.6613e-16
0
0
```

som i praktiken är nollvektorn.

Uppgift 1. Beräkna egenvektorer och egenvärden till följande matriser. Kontrollera genom insättning att beräkningarna är korrekta.

$$(a). \begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 \\ 2 & 0 & 5 \\ 3 & 7 & 11 \end{bmatrix} \quad (b). \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (c). \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 0 & 8 & 5 \\ 7 & -4 & 1 \end{bmatrix}$$

3 Differentialekvationer

Vi skall se på *randvärdesproblem* för ordinär differentialekvation av typen

$$\begin{cases} u''(x) = f(x, u, u'), & x_a \leq x \leq x_b \\ u(x_a) = u_a, & u(x_b) = u_b \end{cases}$$

Oftast går det inte att ge en användbar formel för lösningen, utan vi måste använda beräkningsmetoder för att bestämma en numerisk lösning.

Det finns olika beräkningsmetoder, gemensamt för dem är att de leder till lösning av ett icke-linjärt ekvationssystem eller ett linjärt ekvationssystem i det fall f är linjär i u och u' .

Vi skall i nästa läsperiod se på hur man löser system av icke-linjära ekvationer. För tillfället kommer vi nöja oss med att se på *linjära* randvärdesproblem, dvs. sådana problem som kan skrivas

$$\begin{cases} u''(x) + a(x)u'(x) + b(x)u(x) = f(x), & x_a \leq x \leq x_b \\ u(x_a) = u_a, & u(x_b) = u_b \end{cases}$$

Vanligtvis måste vi beräkna en numerisk lösning, men om a och b är konstanter, dvs. inte beror av x , så finns det som ni vet formler för lösningarna.

Vi skall även lösa linjära *egenvärdesproblem* för ordinär differentialekvation

$$\begin{cases} u''(x) + au'(x) + bu(x) = \lambda u(x), & x_a \leq x \leq x_b \\ u(x_a) = u_a, & u(x_b) = u_b \end{cases}$$

De lösningar $u(x)$ vi söker är skilda från nollfunktionen (dvs. $u(x)$ är inte 0 för alla x) och kallas *egenfunktioner* och talen λ kallas *egenvärden* precis som för matrisproblemen.

Som exempel har

$$\begin{cases} u''(x) = \lambda u(x), & 0 \leq x \leq 1 \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$

följande egenfunktioner och motsvarande egenvärden

$$u_n(x) = B_n \sin(n\pi x), \quad \lambda_n = -n^2\pi^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Lägg märke till att vi har oändligt många lösningar.

4 Differensmetoder

För att lösa problemet

$$\begin{cases} u''(x) + a(x)u'(x) + b(x)u(x) = f(x), & x_a \leq x \leq x_b \\ u(x_a) = u_a, & u(x_b) = u_b \end{cases}$$

gör vi en likformig indelning av intervallet $a \leq x \leq b$ i ett nät

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \cdots < x_n < x_{n+1} = b$$

där $x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n+1$ med $h = \frac{b-a}{n+1}$.

Vi ersätter $u''(x_i)$ och $u'(x_i)$ med centraldifferenskvoter

$$u''(x_i) \approx D_+ D_- u(x_i) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}, \quad u'(x_i) \approx D_0 u(x_i) = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}$$

i de inre nätpunkterna $x_i, i = 1, \dots, n$, och får ekvationssystemet

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + a(x_i) \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + b(x_i)u_i = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Om vi låter u_i beteckna en approximation av $u(x_i)$ så resulterar detta i ett linjärt ekvationssystem.

Som exempel tar vi: *Stationär värmeledning* i en isolerad stav med en värmekälla. Temperaturen $u(x)$ beskrivs av randvärdesproblemet

$$\begin{cases} -\kappa u''(x) = f(x), & 0 \leq x \leq L \\ u(0) = u_0, & u(L) = u_L \end{cases}$$

där u_0 och u_L är temperaturen i stavens ändpunkter, κ är stavens värmeledningsförmåga och $f(x)$ är värmekällan.

Inför nätet $x_i = ih, i = 0, 1, \dots, n+1$ med $h = \frac{L}{n+1}$ på $0 \leq x \leq L$ och låt u_i beteckna approximationer av $u(x_i), i = 0, 1, \dots, n+1$. Ersätt $u''(x_i)$ med centraldifferenskvoten

$$D_+ D_- u(x_i) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

i de inre nätpunkterna $x_i, i = 1, \dots, n$, och vi får

$$\kappa(-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}) = h^2 f(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Med matriser kan detta skrivas

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

där

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \frac{h^2}{\kappa} f(x_1) + u_0 \\ \frac{h^2}{\kappa} f(x_2) \\ \vdots \\ \frac{h^2}{\kappa} f(x_{n-1}) \\ \frac{h^2}{\kappa} f(x_n) + u_L \end{bmatrix}$$

Matrisen **A** är exempel på en *gles matris*, det är stora matriser (många obekanta) med få noll-skilda element (få kopplingar). Vår matris kallas även för en *bandmatris* eller tridiagonal matris. I MATLAB bildar man glesa matriser med **sparse** (allmän gleshetsstruktur) och **spdiags** (bandstruktur).

För vårt exempel bildar vi en vektorer fylld med 1:or, därefter placerar vi in denna vektor (multipliserad med 2 respektive -1) som diagonaler med **spdiags** enligt

```
>> n=30; ett=ones(n,1);
>> A=spdiags([-ett 2*ett -ett],[-1 0 1],n,n);
```

Diagonalerna sätts ihop som kolonner i en matris med **[-ett 2*ett -ett]**, de måste därför vara lika långa. Kolonnerna placeras som diagonaler i ordningen som ges av vektorn **[-1 0 1]** och det hela skall bli en $n \times n$ -matris, därav **n,n** allra sist.

När vi har bildat högerledsvektorn **b** löser vi med backslash (****). När matrisen är lagrad som gles matris känner MATLAB av att det och lösningen av ekvationssystemet görs effektivt med metoder som tar vara på gleshetsstrukturen.

Uppgift 2. Låt $\kappa = 2$, $L = 1$, $u_0 = 40$, $u_L = 60$ samt $f(x) = 200e^{-(x-\frac{L}{2})^2}$. Lös värmeledningsproblemet och rita upp lösningen. Tag $n = 30$.

På motsvarande sätt löser vi egenvärdesproblem för differentialekvation. Efter att ha ersatt derivator med differenskvoter får vi ekvationer som kan skrivas som egenvärdesproblem för matris.

Som exempel tar vi egenvärdesproblemet

$$\begin{cases} -u''(x) = \lambda u(x), & 0 \leq x \leq L \\ u(0) = 0, & u(L) = 0 \end{cases}$$

Låter vi u_i beteckna approximationen av $u(x_i)$ och ersätter $u''(x_i)$ med centradifferenskvoten

$$D_+ D_- u(x_i) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

får vi

$$\begin{cases} \frac{1}{h^2}(-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}) = \lambda u_i & i = 1, 2, \dots, n \\ u_0 = u_{n+1} = 0 \end{cases}$$

Med matriser kan detta skrivas

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

där

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{bmatrix}$$

Uppgift 3. Lös egenvärdesproblemet för $L = 1$ genom att lagra matrisen som en gles matris med **spdiags** och lösa med **eigs**, den glesa varianten av **eig**. Bestäm de tre minsta egenvärdena och rita ut egenvektorererna som approximerar egenfunktionerna. Läs hjälptexten för **eigs**!

5 Partikeln i lådan

Detta avsnitt anknyter till Atkins och Jones kapitel 1.7 som handlar om den tidsberoende Schrödingerekvationen i en dimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

där $V(x)$ är en potential, $\psi(x)$ är vågfunktioner och E sammanhörande energier. Här är $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ där h Plancks konstant.

Ofta skrivs ekvationen på formen

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

där H är den s.k. Hamilton-operatör (differentialoperator)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$\psi(x)$ är en egenfunktion och E ett egenvärde.

För partikeln i lådan (en oändligt djup låda) har vi potentialen

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ +\infty, & \text{annars} \end{cases}$$

Lösningar till differentialekvationen måste vara noll utanför intervallet $0 \leq x \leq L$ för att vara ändligt stora.

Vi kan därför bestämma vågfunktioner och motsvarande energier genom att lösa problemet

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x), & 0 \leq x \leq L \\ \psi(0) = \psi(L) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Vi söker alltså en funktion $\psi(x)$ sådan att om vi deriverar funktionen två gånger, dvs. bildar $\psi''(x)$, och multiplicerar med konstanten $-\frac{\hbar^2}{2m}$ så skall vi få tillbaka $\psi(x)$ multiplicerad med E (ett tal, som vi inte känner). Dessutom skall $\psi(x)$ vara noll vid $x = 0$ och $x = L$ (dvs. vid lådans väggar).

Vi låter $\lambda = \frac{2m}{\hbar^2}E$ och får följande egenvärdesproblem för differentialekvation

$$\begin{cases} -\psi''(x) = \lambda\psi(x), & 0 \leq x \leq L \\ \psi(0) = \psi(L) = 0 \end{cases}$$

Det här problemet löste ni numeriskt med differensmetod i uppgift 3.

Vanligtvis kan egenvärdesproblem bara lösas numeriskt (approximativt), men i det här enkla fallet kan man faktiskt lösa problemet exakt med handräkning.

Så här går det till: Karakteristiska ekvationen blir $r^2 + \lambda = 0$ med lösningar $r_{1,2} = \pm\sqrt{\lambda}i$ och därmed allmänna lösningen

$$\psi(x) = A \cos(\sqrt{\lambda}x) + B \sin(\sqrt{\lambda}x)$$

Randvillkoret $\psi(0) = 0$ ger $\psi(0) = A = 0$ och randvillkoret $\psi(L) = 0$ ger $\psi(L) = B \sin(\sqrt{\lambda}L) = 0$, dvs. $\sqrt{\lambda}L = n\pi, n = 1, 2, \dots$, vilket ger

$$\psi_n(x) = B_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Vi har

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 = \{ \hbar = \frac{\pi}{2} h \} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Konstanten B_n brukar väljas så att

$$\int_0^L \psi_n(x)^2 dx = 1$$

Vi får

$$\int_0^L \psi_n(x)^2 dx = B_n^2 \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx = \frac{L}{2}$$

där vi utnyttjat att ($\alpha = \frac{n\pi}{L}$)

$$\int_0^L \sin^2(\alpha x) dx = \int_0^L \frac{1 - \cos(2\alpha x)}{2} dx = \frac{L}{2} - \left[\frac{\sin(2\alpha x)}{4\alpha} \right]_0^L = \frac{L}{2}$$

eftersom $\sin(0) = 0$ och $\sin(2\alpha L) = 0$ (det gäller att $\sin(\alpha L) = 0 \Rightarrow \sin(2\alpha L) = 0$).

Lösningarna till (1) ges av

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right), \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Uppgift 4. Rita upp $\psi_n(x)$ för $n = 1, 2, \dots, 6$. Jämför med figur 1.25 i Atkins och Jones, sid 18. Jämför dessa grafer med de ni ritade i uppgift 3. Syns det någon skillnad och i så fall vad beror det på?

För mer komplicerade fall av Schrödingerekvationen återstår, som vi sagt tidigare, bara numeriska beräkningsmetoder. Dessa leder alltid till egenvärdesproblem för matriser. Kemiprojektet "Molekylorbitaler med Hückelmetoden" handlar om en sådan metod, men det kommer först i nästa läsperiod.