Chemische binding I, Opdracht 1

dr.ir. Gerrit C. Groenenboom
Subfaculteit Scheikunde
KUN

3 september 2003

1 Inleiding

Een aantal begrippen uit de lineaire algebra worden veel gebruikt in het vak chemische binding. Hier worden aan de hand van een aantal MATLAB opdrachten de begrippen lineaire (on)afhankelijkheid, lineaire stelsels, basis, orthogonaliteit, projectie, determinant, eigenwaarden en eigenvectoren herhaald.

Geef bij het beantwoorden zowel het benodigde MATLAB commando als het "getal", voor zover dit van toepassing is. Probeer zoveel mogelijk gebruik te maken van de vector- en matrix-mogelijkheden van MATLAB. Als je bijvoorbeeld de lengte van een kolom vector $\mathbf{x}$ met drie componenten uit moet rekenen kun je dat oplossen met het statement

```
l=sqrt(x(1)^2+x(2)^2+x(3)^2)
```

Het alternatief

```
l=norm(x)
```

heeft echter een aantal voordelen: de kans op type-fouten is kleiner, het werkt voor vectoren van willekeurige lengte en het wordt door MATLAB sneller uitgerekend. In dit triviale voorbeeld zijn die voordelen natuurlijk niet echt belangrijk, maar bij complexere berekeningen kunnen de voordelen van matrix notatie aanzienlijk zijn.

De vragen met een $(*)$ kun je in eerste instantie overslaan.

2 Lineaire vergelijkingen

Definieer vier kolom vectoren in $\mathbf{R}^3$

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Opgave 2.1 *Wat is de hoek tussen* $\mathbf{a}_1$ *en* $\mathbf{a}_2$*?*

Gegeven is het stelsel lineaire vergelijkingen

$$x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + x_3\mathbf{a}_3 = \mathbf{b}. \tag{2}$$

Opgave 2.2 *Schrijf dit stelsel op in matrix notatie en los het op.*

Genereer twee random getallen (hint: `c=rand(2,1)`) en bereken een nieuwe vector

$$\mathbf{a}_3 = c_1\mathbf{a}_1 + c_2\mathbf{a}_2 \tag{3}$$

en de matrix

$$A = \begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3\end{bmatrix}. \tag{4}$$

Probeer nu het stelsel

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{5}$$

op te lossen.

Opgave 2.3 *Wat is hier aan de hand?*

Opgave 2.4 *Heeft vgl. (5) nu wel of geen oplossingen?*

Met wat puzzelen kunnen we dit wel oplossen. De vraag is hier: vindt het antwoord met één MATLAB statement. [Hint: de kolommen van de matrix A zijn allemaal lineaire combinaties van $\mathbf{a}_1$ en $\mathbf{a}_2$, de vraag is dus eigenlijk, is $\mathbf{b}$ te schrijven als een lineare combinatie van $\mathbf{a}_1$ en $\mathbf{a}_2$? Nog anders gezegd: zijn de drie vectoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, en $\mathbf{b}$ al dan niet lineair afhankelijk].

Opgave 2.5 *Los* y_1 *en* y_2 *op uit*

$$y_1\mathbf{a}_1 + y_2\mathbf{a}_2 = \mathbf{b}. \tag{6}$$

[Hint: als B een $M \times N$ matrix is met $M > N$ en $\mathbf{b}$ een kolom vector met M elementen dan geeft `y=B\b` de vector $\mathbf{y}$ waarvoor $|B\mathbf{y} - \mathbf{b}|$ minimaal is (de zogenaamde "kleinste kwadraten" of "least squares" oplossing). Als $|B\mathbf{y} - \mathbf{b}| = 0$ heb je dus een exacte oplossing].

Vgl. (5) heeft dus in ieder geval één oplossing:

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Opgave 2.6 *Controleer dit numeriek.*

Er zijn zelfs oneindig veel oplossingen, die kunnen geschreven worden als

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + z\mathbf{x}_1, \tag{8}$$

waarbij $\mathbf{x}_1$ een niet-triviale oplossing is van

$$A\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}. \tag{9}$$

Opgave 2.7 *Wat is* $\mathbf{x}_1$*?*

[Hint: kijk in het dictaat wiskunde 2 en 3 voor chemici hoe je "met de hand" de kern van een matrix bepaalt. Hoe gaat dit nu met MATLAB? Het engelse woord voor kern is "null-space". Lees de help informatie van de MATLAB "null" functie en los het probleem op. Als je deze oplossing een beetje flauw vindt: bij vraag 3.3 zullen we het probleem oplossen met meer elementaire MATLAB commandos].

Opgave 2.8 *Bepaal de dimensie van de kern van de matrix A met één* MATLAB *statement.*

[Hint: het engelse woord voor "rang" is "rank". Gok de naam van de MATLAB functie die je hier nodig hebt. In de volgende opgave zullen we zien hoe zoiets uitgerekend kan worden].

Opgave 2.9 *Bepaal de dimensie van het bereik van A [de ruimte opgespannen door de kolommen van A, rang(A)].*

Opgave 2.10 *Construeer een orthonormale basis voor het bereik van A.*

[Hint: dit wil zeggen, bepaal twee vectoren $\mathbf{q}_1$ en $\mathbf{q}_2$ waarmee alle drie de kolommen van A geschreven kunnen worden als

$$\mathbf{a}_j = \sum_{i=1}^{2} \mathbf{q}_i R_{ij}; j = 1 \dots 3 \tag{10}$$

en $\langle \mathbf{q}_i | \mathbf{q}_j \rangle = \delta_{i,j}$. Gebruik de MATLAB routine `qr` die een matrix A factoriseert als $A = QR$, waarbij Q een orthonormale matrix is en R een rechts bovendriehoek matrix, d.w.z. $R_{ij} = 0$ voor $i > j$].

Opgave 2.11 *(*) Waaraan zien we nu dat de rang van A inderdaad 2 is?*

Opgave 2.12 *Controleer numeriek of de* 3×3 *matrix* Q *orthonormaal is.*

[Hint: je moet dus alle inproducten $\langle \mathbf{q}_i | \mathbf{q}_j \rangle$ uitrekenen. Dit kan met één matrix-matrix vermenigvuldiging.]

Opgave 2.13 *Bepaal de projectie* $\mathbf{p}$ *van de vector*

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix} \tag{11}$$

op het vlak V *opgespannen door de vectoren* $\mathbf{q}_1$ *en* $\mathbf{q}_2$ *uit opgave 2.10.*

Opgave 2.14 *(*) Bepaal de afstand tussen* $\mathbf{s}$ *en het vlak* V *gebruik makend van het resultaat van de vorige opgave.*

Opgave 2.15 *(*) Bereken deze afstand opnieuw, maar nu gebruik makend van de vector* $\mathbf{q}_3$ *(de derde kolom van de matrix* Q*).*

[Hint: maak een schetsje met de vectoren $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{s}$ en $\mathbf{p}$].

3 Eigenwaarden en eigenvectoren

Het eigenwaardenprobleem

$$A\mathbf{u} = e\mathbf{u} \tag{12}$$

kan herschreven worden als

$$B(e)\mathbf{u} = 0 \tag{13}$$

met $B(e) = A - eI$, waarbij I een éénheidsmatrix is. Vgl. (13) heeft alleen niet-triviale oplossingen als $B(e)$ singulier is. Neem

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 4 \\ 2 & 2 & 3 \\ 4 & 3 & -1 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Opgave 3.1 *Maak een plot van* $\det(B(e))$ *voor* $e \in [-5, 8]$ *en schat de laagste eigenwaarde* e_1 *van de matrix* A*.*

Opgave 3.2 *Gebruik de routine* `fzero` *om een nauwkeurigere waarde voor* e_1 *te vinden.*

Als de eigenwaarde heel erg nauwkeurig bepaald is kunnen we de eigenvector die voldoet aan

$$B(e_1)\mathbf{u}_1 = 0 \tag{15}$$

vinden zoals bij opgave 2.7. Hier volgen we een andere methode. Als we aannemen dat $\mathbf{u}_1(1)$ niet toevallig precies 0 is, mogen we $\mathbf{u}_1(1)$ gelijk aan 1 nemen. Door dit in te vullen in vgl. (15) kunnen we het stelsel partitioneren

$$\begin{pmatrix} a & \mathbf{b}^T \\ \mathbf{b} & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Uitschrijven geeft

$$a + \mathbf{b}^T\mathbf{y} = 0 \tag{17}$$

$$\mathbf{b} + C\mathbf{y} = \mathbf{0}. \tag{18}$$

Opgave 3.3 *Los* $\mathbf{y}$ *op uit vlg. (18). Construeer en normeer de vector* $\mathbf{u}_1$*.*

Opgave 3.4 *Genereer een random vector met componenten tussen* -1 *en* 1 *(*`x=2*rand(3,1)-1`*) en bereken het zogenaamde Rayleigh quotient*

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\langle \mathbf{x}|A|\mathbf{x}\rangle}{\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle} \tag{19}$$

Het is eenvoudig te bewijzen dat $R(\mathbf{x}) \geq e_1$.

Opgave 3.5 *(*) Probeer een benadering van de laagste eigenwaarde en bijbehorende eigenvector te vinden door in een loop 100 random vectoren te testen met het Rayleigh quotient. Wat is de hoek tussen de benaderde eigenvector en de* $\mathbf{u}_1$ *uit opgave 3.3 ?*

Opgave 3.6 *Gebruik de* MATLAB *routine "*`eig`*" om alle eigenvectoren en eigenwaarden van* A *te vinden.*

Opgave 3.7 *Gebruik de routine "*`sort`*" om de eigenwaarden en bijbehorende eigenvectoren te sorteren zodat* $e_i \leq e_{i+1}$*.*

Opgave 3.8 *Genereer een random (niet orthonormale) basis* $B = [\mathbf{b}_1\mathbf{b}_2\mathbf{b}_3]$ *voor* $\mathbf{R}^3$*.*

De matrix A representeert een lineaire afbeelding $\hat{A}$ in de natuurlijke basis voor $\mathbf{R}^3$. We kunnen het eigenwaardenprobleem

$$\hat{A}\phi = e\phi \tag{20}$$

ook representeren in de niet orthonormale basis B door de vector ϕ te expanderen in deze basis

$$\phi = v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3 \tag{21}$$

en dit in te vullen in vlg. (20), en vervolgens inproducten te nemen met $\mathbf{b}_i, i = 1 \ldots 3$.

Opgave 3.9 *Herschrijf eigenwaardenprobleem vlg. (20) in de basis* B*.*

Het resultaat wordt een gegeneraliseerd matrix eigenwaardenprobleem genoemd.

Opgave 3.10 *(*) Gebruik de* MATLAB *routine "*`eig`*" om dit gegeneraliseerde eigenwaarden problemen op te lossen, sorteer eigenwaarden en bijbehorende eigenvectoren, en vergelijk het resultaat met de eigenwaarden gevonden in opgave 3.7.*

Opgave 3.11 *(*) Transformeer de eigenvectoren van de vorige opgave naar de natuurlijke basis van* $\mathbf{R}^3$ *en vergelijk ze met de eigenvectoren gevonden in opgave 3.7.*

We hebben tot nu toe gebruik gemaakt van de ingebouwde MATLAB functie `det` om de determinant uit te rekenen.

Opgave 3.12 *(*) Schrijf zelf een routine om de determinant van een matrix van willekeurige dimensie uit te rekenen en test je routine met een random* 5×5 *matrix.*

[hint: gebruik de methode "ontwikkelen naar eerste rij" (pagina 59 wiskunde 2 & 3 dictaat) om de determinant van een $n \times n$ matrix uit te drukken in determinanten van matrices van dimensie $n - 1$, en gebruik dat voor een 1×1 matrix geldt $\det(x) = x$].