FYS3150 Project 2

Bernt Jonas Fløde

16. oktober 2018

Sammendrag

Introduksjon

Dette prosjektet skal utvikle en egenverdi-løser basert på Jacobis metode. Vi begynner med å se på bjelke-i-spenn-problemet, med følgende differensialligning:

$$\gamma \frac{d^2u(x)}{dx^2} = -Fu(x),$$

Metode

Bjelke i spenn

For å løse differensialligningen brukes tilnærmingen

$$u'' \approx \frac{u(\rho + h) - 2u(\rho) + u(\rho - h)}{h^2},$$

hvor h er steget og $\rho = x/L$. Dette er ligningen for en bjelke i spenn, der $u(x)$ er den vertikale forskyvningen, F er kraften som blir utført på bjelken og γ er en konstant definert utfra bjelken selv. Definerer så $\rho_i = \rho_0 + ih$ og $u_i = u(\rho_i)$ for $i = 1, 2, ..., N$. og slik at

$$h = (\rho_N - \rho_0)/N = 1/N$$

per definisjon av ρ, og

$$-\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = \lambda u_i$$

som er et ligningssett med $i + 1$ ligninger. På matriseform blir dette

$$\begin{bmatrix} d & a & \dots & \dots & 0 \\ a & d & a & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & a & d & a \\ 0 & \dots & 0 & a & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{bmatrix}$$

der $a = -1/h^2$ og $b = 2/h^2$. Med vår definisjon av h betyr det at $a = -N^2$ og $b = 2N^2$.

Dette ligningssettet har de analytiske løsningene

$$\lambda_j = d + 2a\cos\left(\frac{j\pi}{N+1}\right) \quad \text{for } j = 1, 2, ..., N - 1.$$

Ortogonalitetens bevaring

For å vise at en ortogonal transformasjon på ortogonale vektorer bevarer ortogonaliteten sin, ser vi på en vektorbasis $\mathbf{v}_i$, der

$$\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i = \delta_{ij}.$$

Ser så på den ortogonale transformasjonensmatrisen $\mathbf{U}$,

$$\mathbf{w}_i = \mathbf{U}\mathbf{v}_i,$$

og setter inn, der vi bruker egenskapen $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = I$ for ortogonale matriser,

$$\mathbf{w}_i^T\mathbf{w}_i = (\mathbf{U}\mathbf{v}_i)^T\mathbf{U}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^T\mathbf{U}^T\mathbf{U}\mathbf{v}_i^T = \mathbf{v}_i^T I\mathbf{v}_i^T = \mathbf{v}_i^T\mathbf{v}_i^T = \delta_{ij},$$

som betyr at ortogonaliteten er bevart.

Metode for å finne egenverdier

For å finne egenverdier til en matrise kan vi bruke similaritetstransformasjonen $\mathbf{B} = \mathbf{S}^T\mathbf{A}\mathbf{S}$, der $\mathbf{S}$ har egenskapen $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^T$ og $\mathbf{B}$ ideelt skal bli en diagonalmatrise. Hvis $\mathbf{B}$ er en diagonalmatrisene, er elementene på diagonalen egenverdiene til $\mathbf{A}$.

Utfordringen er å finne riktig matrise $\mathbf{S}$. I stedet for å finne helt riktig matrise, blir strategien å bruke similaritetstransformasjon flere ganger, og velge $\mathbf{S}$ slik at vi får en matrise hvor elementene som ikke ligger på diagonalen statig går nærmere 0. Dette kan gjøres med Jacobis metode, som blir forklart i kap. 7.4 i [1].

Implementering i C++

Programmet src/toeplitz.cpp viser i C++ hvordan Jacobis metode kan brukes til å finne løsningene på bjelke-i-spenn-problemet, ved å finne egenverdier og sammenligne dem med den analytiske løsningen.

Slik settes matrisen opp:

```
double* a = new double[N+1];
double* d = new double[N+1];
double N_sq = pow(N, 2.0);
double a_value = -N_sq;
double d_value = 2*N_sq;
for (int i = 0; i < N+1; i++) {
    a[i] = a_value;
    d[i] = d_value;
}
```

Med en ekstra variabel $(ih)^2$ til å simulere et elektron i et potensial, istedenfor fastspent bjelke, settes matrisen opp slik:

```
double* a = new double[N+1];
double* d = new double[N+1];
double N_sq = pow(N, 2.0);
double a_value = -N_sq;
double d_value = 2*N_sq;
for (int i = 0; i < N; i++) {
    a[i] = a_value;
    d[i] = d_value + pow(i+1, 2.0)/N_sq;
}
```

Med enda en ekstra variabel $\omega^2(ih)^2 + 1/(ih)$ for å simulere to elektrone, settes matrisen opp slik:

```
double* a = new double[N+1];
double* d = new double[N+1];
double N_sq = pow(N, 2.0);
double omega_r_sq = pow(omega_r, 2.0);
double a_value = -N_sq;
double d_value = 2*N_sq;
for (int i = 0; i < N; i++) {
    a[i] = a_value;
    d[i] = d_value + omega_r_sq*pow(i+1, 2.0)/N_sq + N/(i+1.0);
}
```

Resultat og konklusjon

Det tar 3 iterasjoner for similaritetstransformasjonen å gi en diagonalmatrise uansett om $N = 6$, $N = 11$ eller $N = 101$, noe som antyder at dette er uavhengig av N.

Referanser

[1] Morten Hjort-Jensen. “Computational Physics. Lecture Notes Fall 2015”. I: (2015).