

JON VEGARD SPARRE

JOURNAL FOR FYS4150

Prosjekt 1

03.09.2015

Har produsert ein god del av `main.cpp`, men har ikkje kome i hamn med LU-dekomponeringa.

Prosjekt 2

18.09.2015

Har starta på prosjekt 2. Skal løyse Schrödingerlikninga for eit to-elektronsystem. Brukte dagens datalab på å lese gjennom oppgåva og finne ut kva som skulle gjerast og forstå Jacobis metode. Ved å diskretisere Schrödingerlikninga får vi ei eigenverdilikning $Ax = \lambda x$, som skal løysast med denne metoden. Metoden går ut på å diagonalisere matrisa A ved å gange med S^T frå venstre og S frå høgre, S er ei rotasjonsmatrise som blir bestemt av korleis A ser ut. Vi vel så største ikkje-diagonale element i den nye A -matrisa til å vere null og finn rotasjonsvinkelen θ som så gir oss den nye matrisa S (trur eg). Denne prosessen gjentakast N gonger til vi har fått den diagonale matrisa. Når vi har den diagonale matrisa så har vi alle eigenverdiane på diagonalen, og det er dei vi er interessert i. Men samstundes som vi roterer A så blir eigenvektorane endra, det må vi ta hensyn til på eit eller anna vis.

Eg starta på `main.cpp` i går og fekk implementert mesteparten av algoritmen, men den verkar ikkje som den skal enda. Eg sat igjen med ei nesten diagonal matrise, den hadde veldig høge verdier oppe i venstre hjørne, mens nede i høgre hjørne var verdiane i storleksorden 10^{-15} , som jo er "null".