

MAT3360, vår 2022

Obligatorisk oppgave nr. 2 av 2.

Innleveringsfrist: Torsdag 5. mai 2022, klokken 14:30, i Canvas (canvas.uio.no).

Merk at man har **ett forsøk** på å få oppgaven godkjent. Dette betyr at det ikke lenger gis andregangsforsøk.

Du velger selv om du skriver besvarelsen for hånd og scanner besvarelsen eller om du skriver løsningen direkte inn på datamaskin (for eksempel ved bruk av $\text{\LaTeX}$). Besvarelsen skal leveres som én PDF-fil. Scannede ark må være godt lesbare. Besvarelsen skal inneholde navn, emne og oblignummer.

Det forventes at man har en klar og ryddig besvarelse med tydelige begrunnelser. Husk å inkludere alle relevante plott og figurer. Samarbeid og alle slags hjelpemidler er tillatt, men den innleverte besvarelsen skal være skrevet av deg og reflektere din forståelse av stoffet. Er vi i tvil om du virkelig har forstått det du har levert inn, kan vi be deg om en muntlig redegjørelse.

I oppgaver der du blir bedt om å programmere må du legge ved programkoden og levere den sammen med resten av besvarelsen. Det er viktig at programkoden du leverer inneholder et kjøreeksempel, slik at det er lett å se hvilket resultat programmet gir.

Søknad om utsettelse av innleveringsfrist. Hvis du blir syk eller av andre grunner trenger å søke om utsettelse av innleveringsfristen, må du ta kontakt med studieadministrasjonen ved Matematisk institutt (e-post: studieinfo@math.uio.no) senest samme dag som innleveringsfristen.

For å få adgang til avsluttende eksamen i dette emnet, må man bestå alle obligatoriske oppgaver i ett og samme semester.

For fullstendige retningslinjer for innlevering av obligatoriske oppgaver, se her:

www.uio.no/studier/admin/obligatoriske-aktiviteter/mn-math-oblig.html

LYKKE TIL!

Du må ha minst 60% rett for å få godkjent oppgaven. I tillegg må du gi et “fornuftig” svar på spørsmål 9.

I denne oppgaven trenger vi komplekse tall. Vi definerer i slik at $i = \sqrt{-1}$. Et komplekst tall c kan skrives $c = a + ib$ der a og b er reelle tall. a kalles realdelen til c og b kalles imaginærdelen til c . Vi har også at absoluttverdien (lengden) til c er gitt ved

$$|c| = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{c\bar{c}}$$

der den komplekskonjugerte $\bar{c}$ er gitt ved $\bar{c} = a - ib$. Vi har at

$$|cd| = |c| |d| \quad \text{og} \quad \left| \frac{c}{d} \right| = \frac{|c|}{|d|}$$

for komplekse tall c og d . For et komplekst tall c har vi at

$$\frac{d}{dt} e^{ct} = c e^{ct}.$$

Schrödingerligningen for en “partikkel i en boks” er initialverdiproblemet

$$(1) \quad \begin{cases} iu_t = u_{xx}, & x \in (0, 1), \quad t > 0, \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, \\ u(x, 0) = f(x). \end{cases}$$

Her er u en kompleks funksjon

$$u(x, t) = v(x, t) + iw(x, t),$$

der v og w er reelle funksjoner. Tilsvarende er $f = g + ih$ for reelle funksjoner g og h . Dersom f er slik at

$$\int_0^1 |f(x)|^2 dx = 1,$$

så er $|u(x, t)|^2$ sannsynlighetstettheten for partikkelens posisjon ved tiden t . Med andre ord, sjansen for at partikkelen er i intervallet $(a, b) \subset [0, 1]$ ved tiden t er gitt ved

$$\int_a^b |u(x, t)|^2 dx.$$

Spørsmål 1. Finn en familie av løsninger $\{u_k(x, t)\}_{k=1}^\infty$ av

$$iu_t = u_{xx}, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0.$$

Spørsmål 2. Finn løsningen til (1) dersom

$$f(x) = \sin(\pi x) + i \sin(2\pi x).$$

Spørsmål 3. Finn en formell løsning av (1) hvis $f(x) = i$.

Spørsmål 4. Vis at realdelen og imaginærdelen til u (der u løser (1)) tilfredsstiller ligningssystemet

$$\begin{cases} v_t = w_{xx} & t > 0, x \in (0, 1), \\ v(0, t) = v(1, t) = 0 & t > 0, \\ v(x, 0) = g(x), \end{cases} \quad \text{og} \quad \begin{cases} w_t = -v_{xx} & t > 0, x \in (0, 1), \\ w(0, t) = w(1, t) = 0 & t > 0, \\ w(x, 0) = h(x). \end{cases}$$

Spørsmål 5. Sett

$$P(t) = \int_0^1 |u(x, t)|^2 dx.$$

Vis at $P'(t) = 0$ og forklar hvorfor dette medfører at (1) har høyst én løsning.

Vi definerer nå en numerisk metode for å løse (1). La $N \geq 1$, sett $\Delta x = 1/(N+1)$, $x_j = j\Delta x$ for $j = 0, 1, \dots, N+1$, $\Delta t > 0$, $t_m = m\Delta t$, $m \geq 0$. La $\theta \in [0, 1]$ og la v_j^m tilfredsstille

$$(2) \quad i \frac{v_j^{m+1} - v_j^m}{\Delta t} = \theta \frac{1}{\Delta x^2} (v_{j+1}^m - 2v_j^m + v_{j-1}^m) + (1 - \theta) \frac{1}{\Delta x^2} (v_{j+1}^{m+1} - 2v_j^{m+1} + v_{j-1}^{m+1}),$$

for $m \geq 0$ og $j = 1, \dots, N$, I tillegg gjelder randbetingelsene $v_0^m = v_{N+1}^m = 0$ for $m = 0, 1, 2, \dots$. Initialverdiene v_j^0 er gitt ved

$$v_j^0 = f(x_j) \quad \text{for } j = 1, \dots, N.$$

Merk at v_j^m blir et komplekst tall. Definer den (komplekse) vektoren $\mathbf{v}^m = (v_1^m, v_2^m, \dots, v_N^m)^\top$.

Spørsmål 6. Forklar hvorfor (2) er et rimelig skjema for å beregne tilnærmede løsninger av (1). Hvis du ikke vil forklare, kan du beregne trunkeringsfeilen.

Spørsmål 7. Vis at skjemaet (2) kan skrives som

$$(3) \quad (I - i(1 - \theta)rA) \mathbf{v}^{m+1} = (I + i\theta rA) \mathbf{v}^m$$

der $r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, I betegner identitetsmatrisen i $\mathbb{C}^{N \times N}$ og A er den tridiagonale matrisen

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Spørsmål 8. Vis at skjemaet (2) er ubetinget (Neumann)stabilt dersom $\theta \leq 1/2$ og at det er ustabilt hvis $\theta > 1/2$.

Spørsmål 9. Implementer skjemaet (2). Det er enklest å starte med vektorformuleringen (3). Her er to par generelle råd:

- Bruk komplekse variable. Dette er helt smertefritt i Matlab, og kan også gjøres i Python etc.
- Ikke regn ut inversmatriser, løs ligninger isteden!
- Ikke bruk store matriser unødvendig.
- Kommenter koden din!!

Test koden din med $\theta = 1/2$, $N = 100$, $\Delta t = \Delta x/2$ og initialdata som i oppgave 2. Plot beregnet og eksakt sannsynlighetsfordeling $|u(x, t)|^2$ for $t = 1$.