

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



# Robni problem lastnih vrednosti

8. naloga pri Matematično-fizikalnem praktikumu

**Avtor:** Marko Urbanč (28191096)  
**Predavatelj:** prof. dr. Borut Paul Kerševan

20.12.2021

# **Kazalo**

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Naloga</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Opis reševanja</b>	<b>3</b>
<b>4</b>	<b>Rezultati</b>	<b>7</b>
4.1	Neskončna potencialna jama . . . . .	7
4.2	Končna potencialna jama . . . . .	9
<b>5</b>	<b>Komentarji in izboljšave</b>	<b>11</b>
	<b>Literatura</b>	<b>12</b>

# 1 Uvod

Pri robnem problemu lastnih vrednosti imamo podano diferencialno enačbo in nekaj robnih pogojev. Robnih pogojev je običajno toliko, kolikor je red enačbe. Problem rešimo tako, da določimo *lastne funkcije*, ki ustrezajo danim robnim pogojem in *lastne vrednosti*, ki skupaj zadoščajo diferencialni enačbi. Zaradi tega je reševanje robnih problemov lahko bistveno bolj zapleteno kot integracija začetnih vrednosti.

Za reševanje tovrstnih problemov sta značilna pristopa diferenčna in strelska metoda. Pri tej nalogi bomo obravnavali obe.

Pri diferenčni metodi diskretiziramo prostorske koordinate na  $N$  korakov in tudi robne pogoje. Drugi odvod aproksimiramo z drugo diferenco. V našem primeru rešujemo stacionarno Schrödingerjevo enačbo (1) za neskončno potencialno jamo ( $V(-a/2 < x < a/2) = 0$  in  $V(|x| \geq a/2) \rightarrow \infty$ ) za končno potencialno jamo ( $V(|x| \geq a/2) = V_0$ ).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (1)$$

Z diferencami aproksimirana enačba ima tako obliko:

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + E\psi_i = 0$$

Robna pogoja na mejah jame diskretiziramo v:

$$c_1\psi_0 + c_2 \frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} = 0,$$
$$d_1\psi_N + d_2 \frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2h} = 0.$$

Pri neskončni jami sta pogoja prazaprov preprosta saj velja  $\psi_0 = \psi_N = 0$ . V našem primertu tako dobimo tridiagonalni sistem velikosti  $N$  oz. linearni sistem enačb:

$$A\vec{\psi} = \lambda\vec{\psi},$$

ki ga rešimo z diagonalizacijo in tako dobimo lastne vektorje (pravzaprav lastne funkcije)  $\vec{\psi}$  in lastne vrednosti  $\lambda$ .

Pri strelski metodi pravzaprav robni problem prevedemo na problem začetne vrednosti. Pri teh metodi poskušamo z različnimi rešitvami, dokler ne poiščemo takih začetnih pogojev, da zadostimo podani robni vrednosti. Ime izhaja iz tega, da pri tej metodi "izstrelimo" trajektorije v različne smeri (različne začetne vrednosti za odvod), dokler ena trajektorija ne zadane robno vrednost na drugi strani. Tako torej lahko začnemo s "kosinusnim" začetnim pogojem v izhodišču  $\psi(0) = 1$ ,  $\psi'(0) = 0$  ali "sinusnim" pogojem  $\psi(0) = 0$ ,  $\psi'(0) = 1$ , nato pa z nekim izbranim  $E$  diferencialno enačbo s poljubno integracijsko shemo integriramo do roba  $x = a/2$  in tam preverimo, ali je izpolnjen drugi robni pogoj,  $\psi(a/2) = 0$ . Pri nas je vrednost  $E$  tisti parameter, ki ga spreminjamo, da "zadanemo" pravilne rešitve. Vrednosti  $E$ , ki nam uspešno dajo rešitev so pravzaprav lastne vrednosti energije.

## 2 Naloga

Naloga od nas zahteva, da za končno in neskončno potencialno jamo določimo nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti energije. Uporabimo naj obe prej opisani metodi.

Pri končni jami se spremenita pravzaprav le robna pogoja na mejah, kjer zahtevamo zveznost in zvezno odvedljivost. Torej ima robni pogoj pri  $x = a/2$  obliko:

$$c_1\psi(a/2) + c_2\psi'(a/2) = 0$$

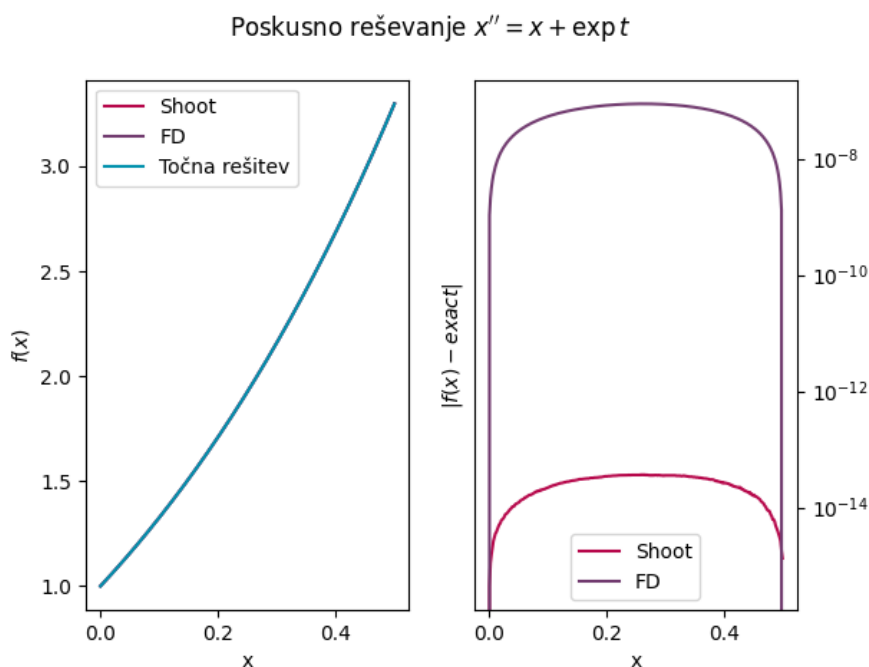
Dodatno sem v si pogledal rešitve tudi nekaterih drugih potencialov.

## 3 Opis reševanja

Tradicionalno sem se problema lotilv Pythonu, kjer sem uporabljal `matplotlib` za vso risanje in `NumPy` za vse numerične postopke. Profesor je priložil že napisani funkciji za obe metodi v datoteki `bvp.py`

Kot zadnje parkrat sem imel z podanima že pripravljenima metodama težave. Uspešno sem lahko rešil nek poskusni problem robnih vrednosti. Nisem ju pa nikakor uspel uporabiti v korist za reševanje potencialne jame. Tu je predstavljena rešitev robnega problema na intervalu  $[0, 0.5]$ :

$$x'' = x + 4e^t, \quad x(0) = 1, \quad x(1/2) = 2e^{\frac{1}{2}}$$



Slika 1: Poskusno reševanje z podanima metodama

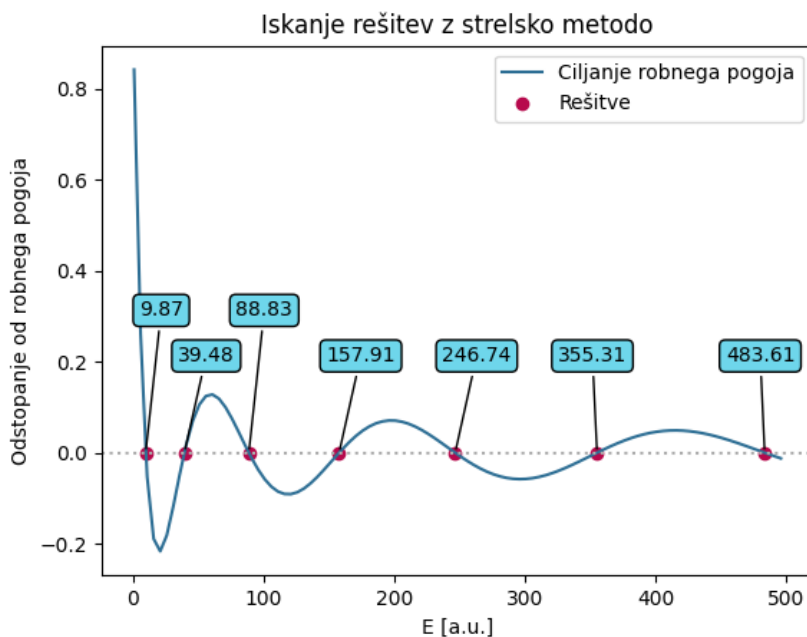
Tako se mi je zdelo najbolj smiselno, da obe metodi napišem sam, ker imam s tem nadzor nad vsem kar se dogaja in vem, kako kaj zares deluje. Svojo implementacijo strelske metode sem celo izboljšal, ker sem uporabil PEFRL integracijsko shemo, ki je simplektična in nudi tudi zelo zgledno natančnost. Numerično dobljene rešitve sem v primeru neskončne potencialne jame primerjal z analitičnimi rešitvami:

$$\psi_n(x) = \cos \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\psi_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

kjer je  $L$  širina jame.

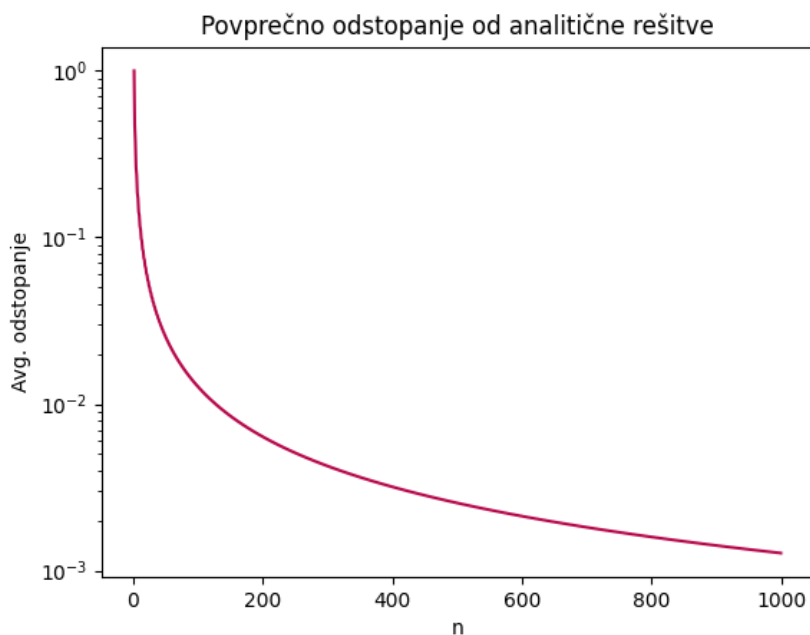
Zanimivo mi je bilo si pogledati, kako strelska metoda pravzaprav išče rešitve, ki zadoščajo robnim pogojem. Z ekstrahiranjem array-ov z PyCharm *razhroščevalcem* (angl. debugger) sem lahko narisal graf le tega. Označene točke ustrezajo ničlam odstopanja od robnega pogoja in tako predstavljajo lastne vrednosti energije. Točke sem v svoji implementaciji strelske metode določil na grobo z trikom, kjer iščeš spremembe predznakov v elementih array-a in nato bolj natančno z uporabo Newton-Raphsonove metode [1].



Slika 2: Iskanje rešitev z strelsko metodo

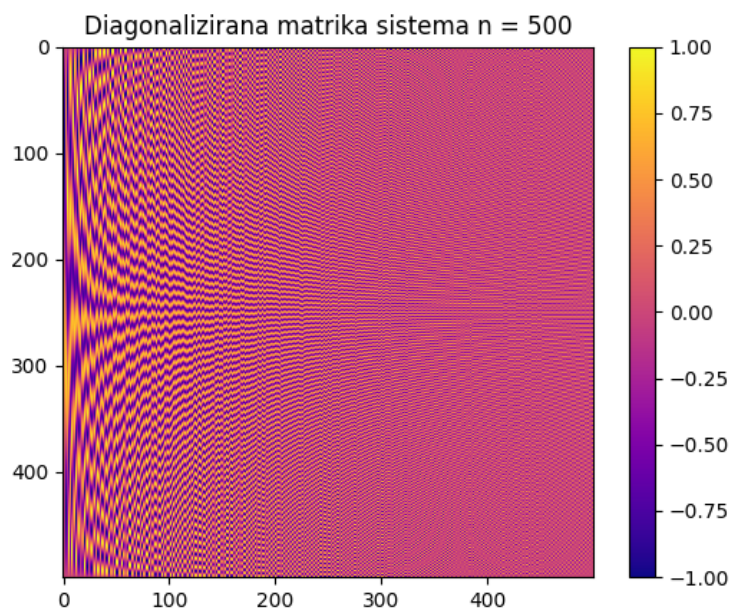
Z svojo implementacijo diferenčne metode pa nisem tako zadovoljen. Predvsem me moti zelo slaba natančnost glede na analitične rešitve. Ob večanju dimenzij matrike se seveda natančnost izboljšuje, ampak sem hitro dosegel mejo, kjer je mojemu računalniku zmanjkalo spomina. Poskusil dodatno pridobiti na spominu z uporabo 32-bit float podatkovnega tipa namesto 64-bit float, ampak ni bilo zelo koristno. Dodatno sem prosil za dostop do strežnika **Marvin**, ki ga imajo na fakulteti za strojno učenje. Marvin očitno ni nastavljen tako, da bi mi lahko pomagal. Vse matrike bistveno večje od dimenzije  $n = 10000$  prekine tekom diagonalizacije. Sumim, da je to zato, ker ima neko nastavitvev, da ubije procese, ki uporabljajo ogromno spomina. Kakorkoli, žal si nisem uspel pomagati z njim.

Napravil sem animacijo kako se oblika osnovnega lastnega stanja spreminja z večanjem dimenzije matrike. Animacijo bom priložil k oddaji. Pogledal sem si tudi, kako se z večanjem matrike spreminja povprečno odstopanje, ki mogoče ni najboljše merilo, ampak je trend vseeno dovolj jasen.

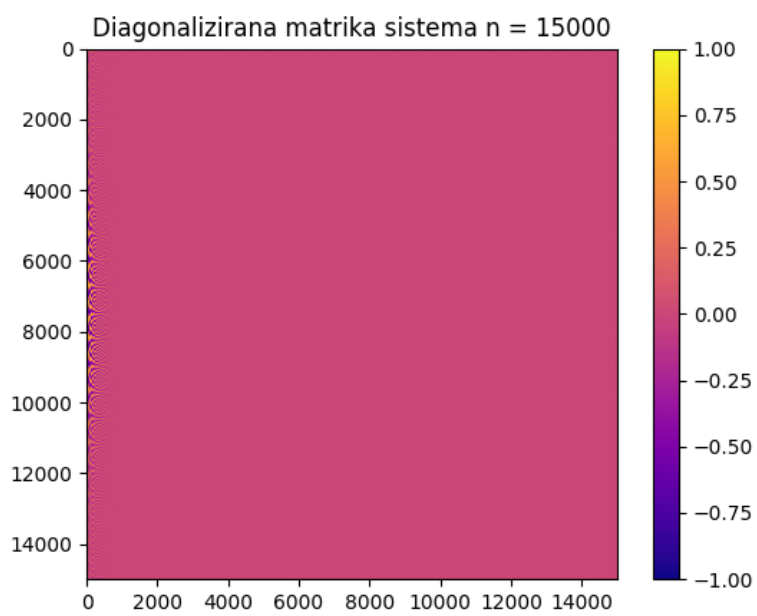


Slika 3: Odstopanje od analitične rešitve z večanjem  $n$

Za zabavo sem si narisal tudi kako izgleda matrika sistema po diagonalizaciji, torej matrika, kjer so stolpci lastne funkcije. Tu se je izkazalo, da so manjše matrike pravzaprav bolj primerne.



Slika 4: Diagonalizirana matrika sistema



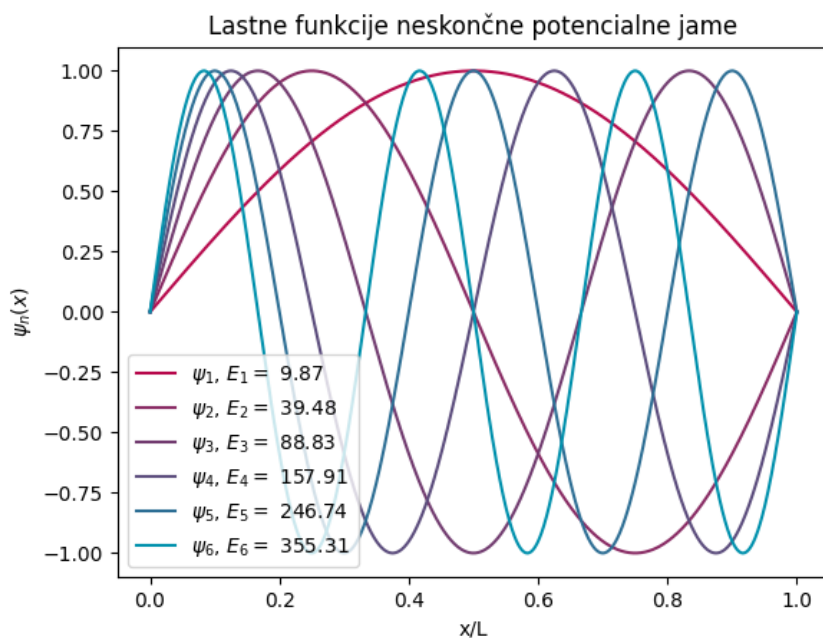
Slika 5: Diagonalizirana matrika sistema, kjer se žal ne vidi več detailov

## 4 Rezultati

Obdelava podatkov pri tej nalogi je pravzaprav dokaj preprosta, čeprav mi je vzela veliko časa (bolj natančno opisano v 5). Tako lahko kar takoj predstavim rezultate. V obeh primerih ne znam razložiti razloga za odstopanja lastnih energij.

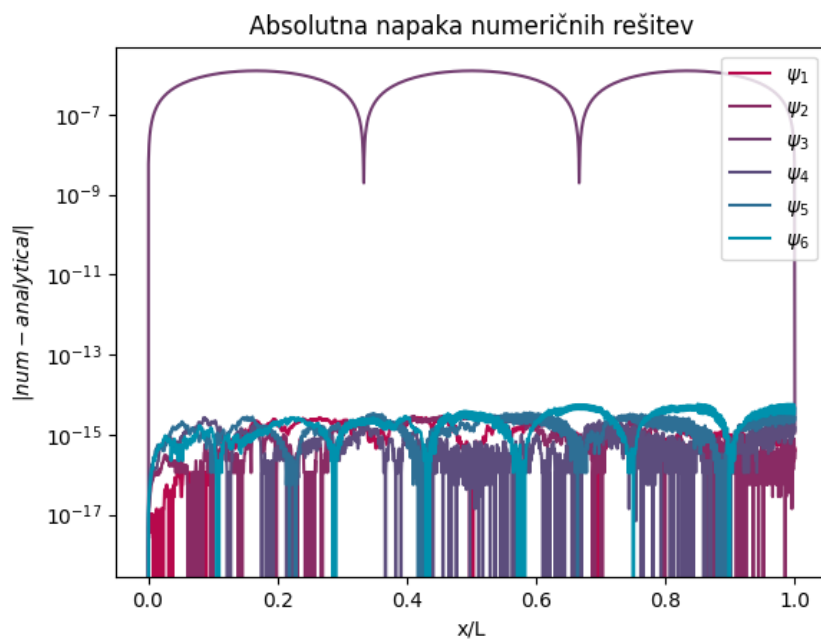
### 4.1 Neskončna potencialna jama

Pri strelski metodi sem pravzaprav parametriziral neskončno potencialno jama kot ( $V(0 < x < a) = 0$  in  $V(0 < x, x > a) \rightarrow \infty$ ). Zelo sem zadovoljen z rezultati in natančnostjo. Ne vem zakaj ima eno stanje nekoliko večjo napako. Sem velikokrat pogledal v svojo kodo in nisem našel, kje bi lahko bila napaka. Energija je zapisana v arbitrarnih enotah.



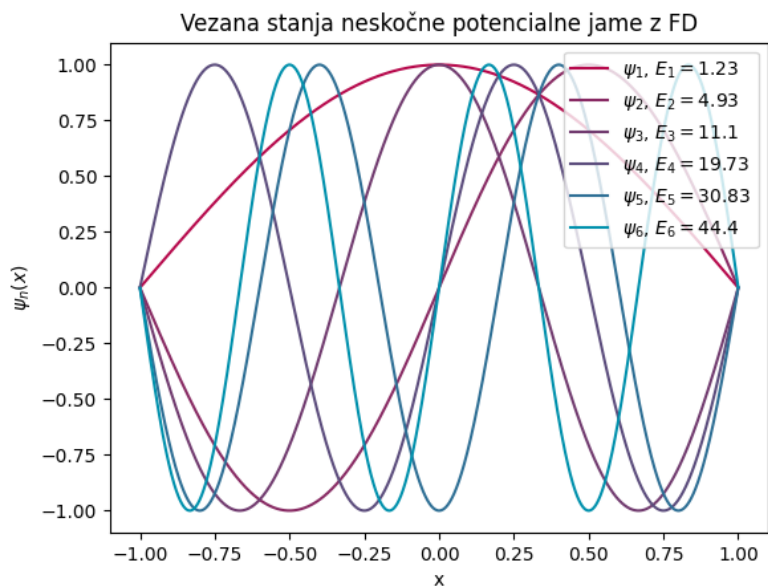
Slika 6: Neskončna potencialna jama rešena s strelsko metodo



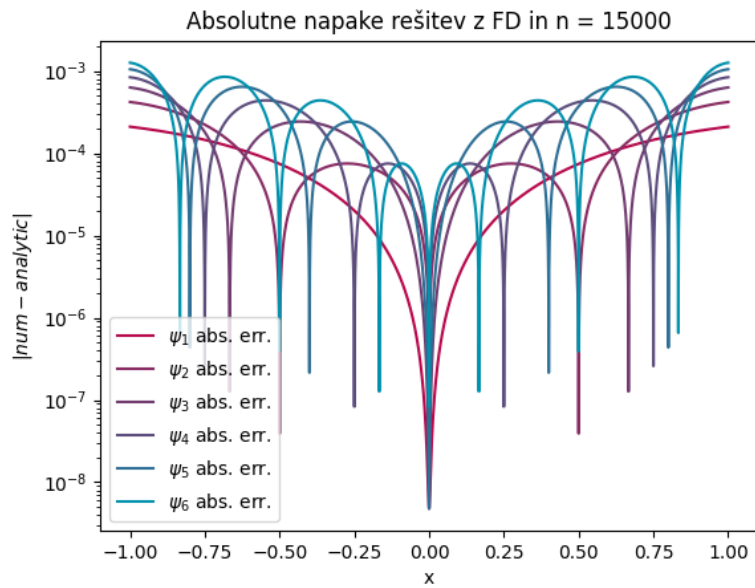


Slika 7: Napake reševanja s strelsko metodo

Z diferenčno metodo pa sem dobil manj zgljedno natančnost tudi že z ogromnimi matrikami (tudi dobesedno ker  $n = 15000$  zavzame 1.7 GB na disku).



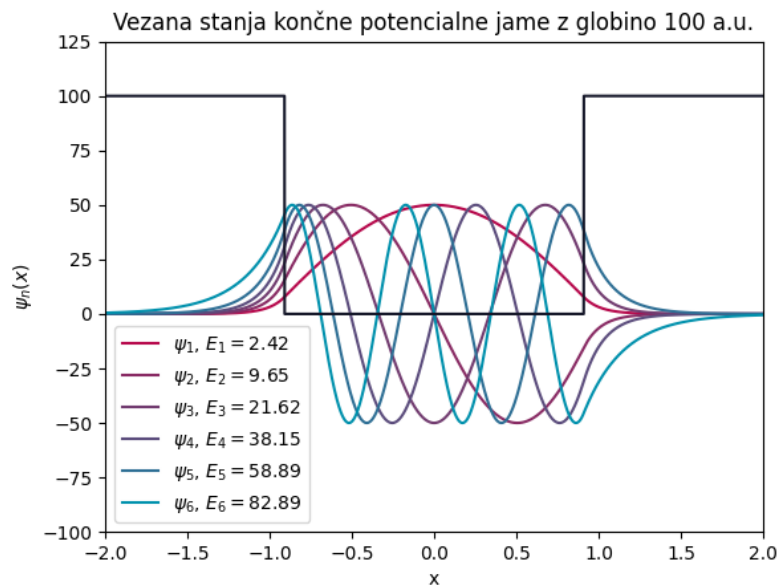
Slika 8: Neskončna potencialna jama rešena z diferenčno metodo



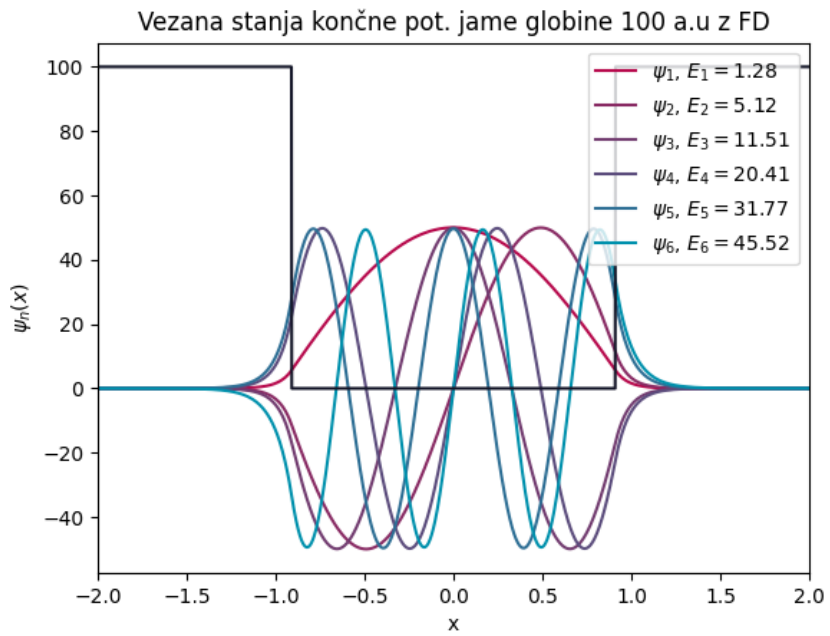
Slika 9: Napake reševanja z diferenčno metodo

## 4.2 Končna potencialna jama

Zelo so mi všeč rezultati obeh metod. Žal pa tu nisem primerjal z analitičnimi rešitvami. Spet so lastne energije in globina jame podana v arbitrarnih enotah.



Slika 10: Končna potencialna jama rešena s strelsko metodo



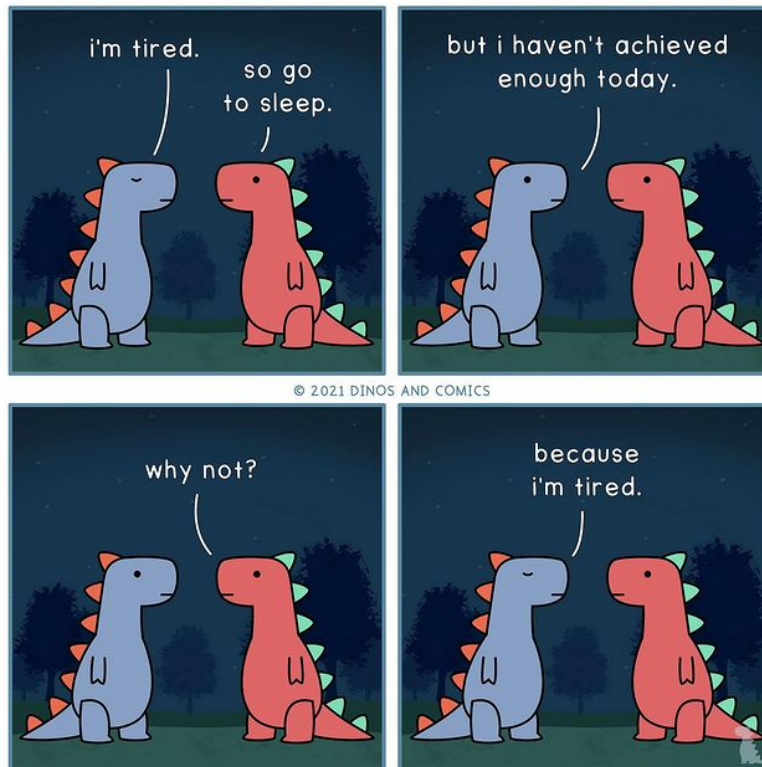
Slika 11: Končna potencialna jama rešena z diferenčno metodo

## 5 Komentarji in izboljšave

Zdi se mi, da sem zopet večino pomembnih komentarjev podal že sproti. Naloga mi je vzela strahotno dolgo časa predvsem kot kombinacija svojih osebnih težav z zdravjem in iskanjem raznih napak v kodi. Vseh rutin sem se lotil napisati po svoje. Pri strelnski metodi sem zapravil dobre 3 dni za iskanje napak, ki so se nakoncu izkazali kot en napačen predznak in čudna normalizacija.

Razočaran sem predvsem nad slabo natančnostjo implementacije diferenčne metode. Čudno mi je bilo tudi to, da Marvin ni želel sprocesirati večjih matrik ampak se v to nisem preveč spuščal, saj že tako ali tako zamujam oddajni rok. Celo komentar k nalogi je že bil, torej je sploh kakšen smisel, da oddam, če ne morem kakšen svoj dober graf pokazati kolegom?

Nalogo bi gotovo lahko izboljšal z bolj natančnim raziskovanjem, zakaj pride do razlik lastnih energij in z več grafov "tretje generacije". Žal pa ob hudi stiski (tako v življenju, kot s časom) nisem uspel priti kaj dlje.. I'm sorry



Slika 12: Včasih sem podoben tem dinozavrom

## Literatura

- [1] Wikipedia. Newton's method — Wikipedia, the free encyclopedia. <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Newton's%20method&oldid=1057061122>, 2021. [Online; accessed 25-December-2021].