Lab 10

Filip Jędrzejewski

June 20, 2023

Opis problemu

Celem zadania było rozwiązanie bezczasowego równania Schrodingera:

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2}\right)+\frac{(n_1^2+n_2^2)\pi^2}{2L^2}\psi(x,y) \tag{1}$$

przy czym:
$x \in (-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$ - pierwsza współrzędna położenia cząstki,
$y \in (-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$ - druga współrzędna położenia cząstki,
$\psi(x, y)$ - szukana funkcja falowa,
L - szerokość studni potencjału,
n_1, n_2 - liczby kwantowe.

Jednostki dobrano w ten sposób, że iloraz $\frac{h}{2\pi m} = 1$ oraz przyjęto, że $L = 2$.

Warunki brzegowe

Warunki brzegowe dla $|x| = \frac{L}{2}$ lub $|y| = \frac{L}{2}$:

$$\psi(x,y) = 0 \tag{2}$$

Rozwiązanie analityczne

Analityczna postać rozwiązania tego równania z powyższymi warunkami brzegowymi ma następującą postać:

$$\psi(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n_1\pi(x+\frac{L}{2})}{L}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi(y+\frac{L}{2})}{L}\right) \tag{3}$$

Rozwiązanie korzystające z PINN

Zadanie rozwiązywano korzystając z biblioteki DeepXDE.

Importy i stałe

```
import numpy as np
import deepxde as dde
import matplotlib.pyplot as plt

L = 2
```

Tworzenie dziedziny

```
geometry1 = dde.geometry.Hypercube(xmin=[-L/2, -L/2, 0.99, 0.99],
                                   xmax=[L/2, L/2, 1.01, 1.01])
geometry2 = dde.geometry.Hypercube(xmin=[-L/2, -L/2, 1.99, 1.99],
                                   xmax=[L/2, L/2, 2.01, 2.01])

geometry = dde.geometry.CSGUnion(geometry1, geometry2)

geometry1 = dde.geometry.Hypercube(xmin=[-L/2, -L/2, 0.99, 1.99],
                                   xmax=[L/2, L/2, 1.01, 2.01])
geometry2 = dde.geometry.Hypercube(xmin=[-L/2, -L/2, 1.99, 0.99],
                                   xmax=[L/2, L/2, 2.01, 1.01])

geometry = dde.geometry.CSGUnion(geometry, geometry1)
geometry = dde.geometry.CSGUnion(geometry, geometry2)
```

Definicje funkcji

```
def pde(x, u):
    du_xx = dde.grad.hessian(u, x, i=0, j=0)
    du_yy = dde.grad.hessian(u, x, i=1, j=1)
    n1 = x[:, 2:3]
    n2 = x[:, 3:4]
    return (du_xx + du_yy)/2 + (n1**2 + n2**2) * np.pi**2 * u / (2 * L**2)

def solution(x):
    xi = x[:, 0:1]
    yi = x[:, 1:2]
    n1 = x[:, 2:3]
    n2 = x[:, 3:4]

    return 2/L * np.sin(n1*np.pi*(xi+L/2) / L) * np.sin(n2*np.pi*(yi+L/2) / L)
```

Warunki brzegowe

```
def boundaryFunction(x, on_boundary):
    if dde.utils.isclose(x[0], 0) or dde.utils.isclose(x[1], 0):
        return True
    if on_boundary and (dde.utils.isclose(abs(x[0]), L/2)
                        or dde.utils.isclose(abs(x[1]), L/2)):
        return True
    return False



boundary_conditions = dde.icbc.DirichletBC(geometry,
                                           lambda x: solution(x),
                                           boundaryFunction
                                           )
```

Tworzenie danych

```
data = dde.data.PDE(geometry,
                    pde,
                    boundary_conditions,
                    num_domain=3000,
                    num_boundary=5000,
                    num_test=1500
                    )
```

Definiowanie sieci

```
net = dde.nn.FNN([4]+[30]*2+[1],
                 "tanh",
                 "Glorot normal"
                 )
```

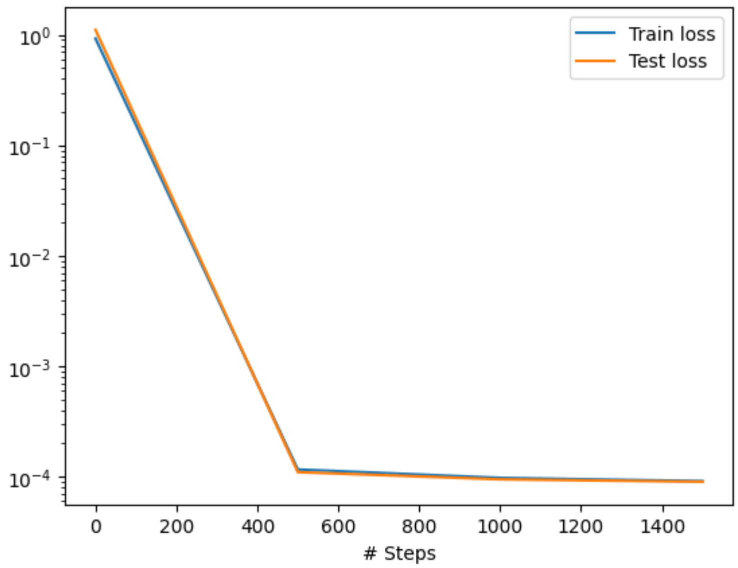
Tworzenie modelu

```
model = dde.Model(data, net)

model.compile("adam", lr=0.01)
```

Trenowanie modelu

```
loss_history, train_state = model.train(iterations = 1500, display_every=500)
dde.saveplot(loss_history, train_state, issave=False, isplot=True)
```

Wykres funkcji kosztu w zależności od liczby iteracji

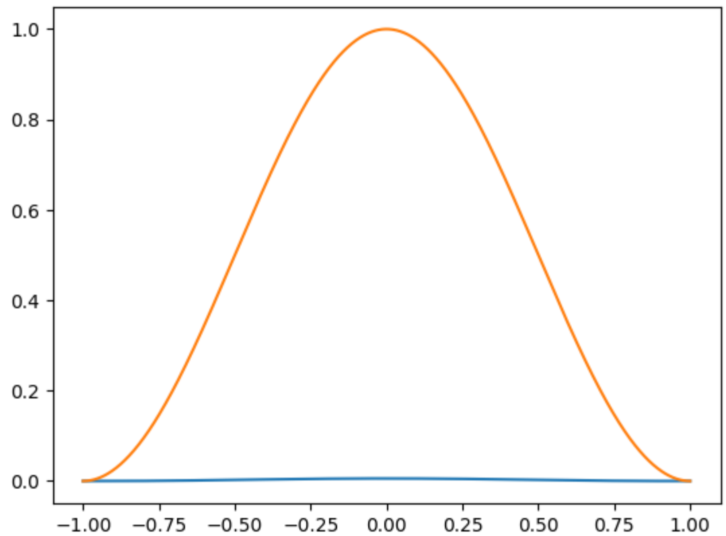


Wykresy

Kod

```
xData = np.linspace(-L/2, L/2, 1000)
yData = np.linspace(-L/2, L/2, 1000)
n1 = np.array([1 for i in range(1000)])
n2 = np.array([1 for i in range(1000)])

X = np.vstack((np.ravel(xData), np.ravel(yData), np.ravel(n1), np.ravel(n2))).T


y_pred = model.predict(X)

y_true = solution(X)

plt.plot(X[:, 0:1], y_pred)
plt.plot(X[:, 0:1], y_true)
plt.show()
```

Wykresy funkcji $\psi(x, y)$ oraz jej przybliżenia znalezionego przez sieć



linia pomarańczowa - rozwiązanie analityczne, linia niebieska - rozwiązanie znalezione przez sieć.

Wykres błędu względnego

```
errors = abs(y_pred - y_true) / y_true
plt.plot(X[:, 0:1], errors)
plt.show()
```