Równania różniczkowe cząstkowe

Zadanie 1. Cząsteczka w dwuwymiarowej studni potencjału. Cząsteczka odbija się od ścian dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału o szerokości L. Zachowanie cząsteczki opisane jest bezczasowym równaniem Schrödingera

$$\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2}\Big) + \frac{(n_1^2+n_2^2)\pi^2}{2L^2}\psi(x,y) = 0 \text{ dla każdego } x \in \Omega\,, \tag{1}$$

gdzie:
$(x, y) \in \mathbb{R}^2$ to położenie cząstki,
Ω to dziedzina równania, $\Omega = \{(x, y) \mid -\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2} \text{ oraz } -\frac{L}{2} \le y \le \frac{L}{2}\}$,
$\psi(x, y)$ to funkcja falowa, której postaci szukamy,
L to szerokość studni potencjału,
n_1, n_2 to liczby kwantowe.

Jednostki dobrano w ten sposób, że iloraz $\frac{\hbar}{m}$ jest równy 1. Przyjmij $L = 2$. Warunków brzegowe zdefiniowane są następująco:

$$\psi(x, y) = 0 \text{ dla } |x| = \frac{L}{2} \text{ lub } |y| = \frac{L}{2}\,. \tag{2}$$

Analityczna postać rozwiązania równania (1) z warunkami brzegowymi (2) jest następująca:

$$\psi(x,y) = \begin{cases} \frac{2}{L}\sin\big(\frac{n_1\pi(x+\frac{L}{2})}{L}\big)\sin\big(\frac{n_2\pi(y+\frac{L}{2})}{L}\big) \text{ dla } x \in \Omega \\ 0 \text{ w przeciwnym wypadku} \end{cases} \tag{3}$$

Rozwiąż powyższe zagadnienie brzegowe (1),(2) dla $(n_1, n_2) \in \{1, 2\} \times \{1, 2\} = \{(1, 1), (1, 2), (2, 1), (2, 2)\}$. Do rozwiązania użyj sieci neuronowych PINN (ang. *Physics-informed Neural Network*), wykorzystując bibliotekę `DeepXDE`. Warstwa wejściowa sieci powinna posiadać 4 neurony, $L_0 = (x, y, n_1, n_2)$, kodujące odpowiednio położenie cząstki (x, y) oraz liczby kwantowe n_1, n_2. Jako funkcję aktywacji przyjmij tangens hiperboliczny, tanh. Przykładowe wartości hiperparametrów można znaleźć w [2, str. 221].
Stwórz następujące wykresy:

- Wykres funkcji kosztu w zależności od liczby epok
- Wykres konturowy funkcji $\psi(x)$, tj. dokładnego rozwiązania

– Wykres konturowy funkcji $\hat{\psi}(x)$, tj. rozwiązania znalezionego przez sieć neuronową

– Wykres konturowy funkcji błędu względnego L_2: $(|\psi(x) - \hat{\psi}(x)|/|\psi(x)|)^2$.

Uwaga. W przypadku wykorzystania backendu `tensorflow` należy użyć wersji tensorflow v1.

Literatura

[1] Peter Atkins, de Paula Julio, Chemia Fizyczna, PWN, 2021

[2] Lu Lu, Xuhui Meng, Zhiping Mao, George Em Karniadakis DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations