

Poročilo o reševanju robnega problema za neskončno in končno potencialno jamo

Avtor: Gašper Harej

May 2025

1 Uvod

V tem poročilu primerjam dve numerični metodi, finite difference (FD) in shooting, za reševanje stacionarne Schrödingerjeve enačbe v neskončni potencialni jami na intervalu $[0, L]$. Poleg tega v dodatni nalogi obravnavam končno potencialno jamo in analiziram, kateri vir napake pri FD metodi – trunkacijska aproksimacija drugega odvoda ali velikost matrike (zrnatost intervala) – prevladuje.

2 Metode

2.1 Analitične rešitve

Za enodimenzionalno neskončno jamo velikosti L so lastne energije

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2},$$

ter valovne funkcije

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right),$$

pri čemer sem uporabil brezdimenzijske enote, tako da velja $\hbar^2/2m = 1$.

2.2 Finite Difference (FD)

Pri FD metodi diskretiziram delovni interval na $N + 2$ točk z razmikom $h = L/(N + 1)$ in predstavim operater drugega odvoda kot tridiagonalno matriko z elementi $2/h^2$ na diagonali in $-1/h^2$ na stranskih diagonalah. Matrični lastni problem diagonaliziram s funkcijo `eigh_tridiagonal`. Teoretična lokalna trunkacijska napaka pri aproksimaciji drugega odvoda je reda $\mathcal{O}(h^2)$.

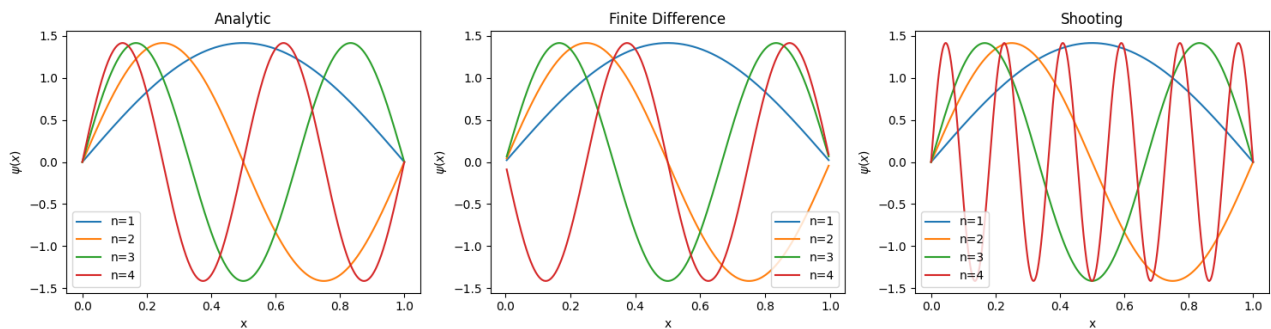
2.3 Shooting

Metoda streljanja pretvori robni problem $\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$ v iterativno iskanje začetne naklona $\psi'(0)$ z uporabo sekantne metode in integracijo z `solve_ivp` (metoda RK45). Energijo E prilagajam, dokler vrednost $\psi(L)$ ne doseže zahtevane tolerance, nato rekonstruiram valovno funkcijo na celotnem intervalu.

3 Rezultati za neskončno jamo

3.1 Valovne funkcije za $n = 1 \dots 4$

Slika 1 prikazuje valovne funkcije za nivoje $n = 1, 2, 3, 4$. V prvem stolpcu so analitične rešitve, v drugem numerične rešitve s FD metodo in v tretjem s shooting metodo.

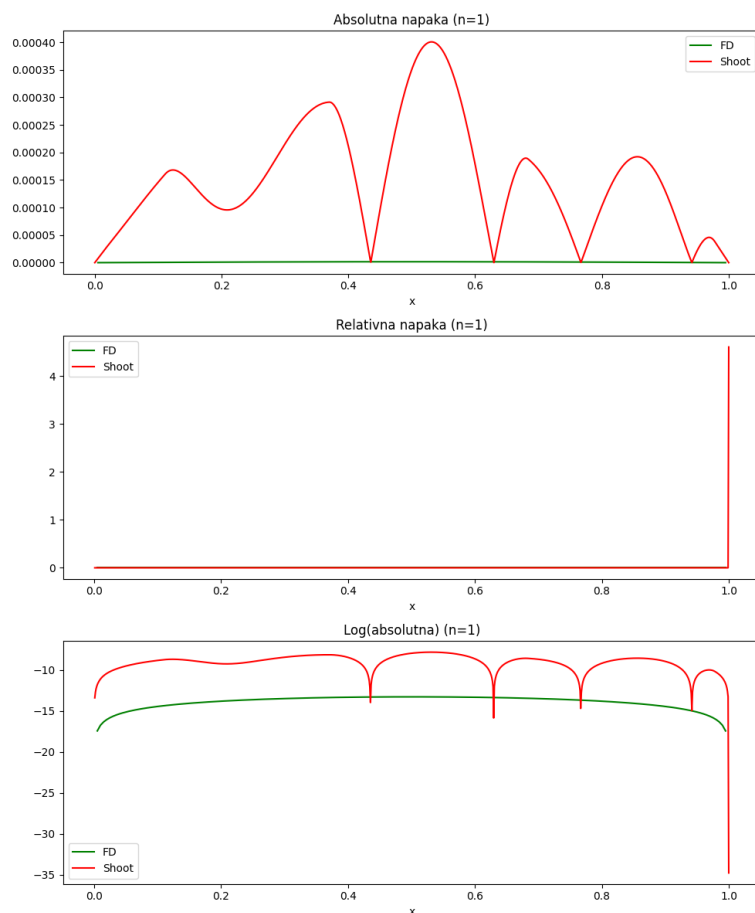


Slika 1: Valovne funkcije za nivoje $n = 1, 2, 3, 4$: analitične (levo), FD (sredina) in shooting (desno).

Pri analitičnih oblikah so funkcije gladke sinusne oblike in imajo ničle natančno v robovih. Numerične FD rešitve sledijo tem oblikam z visoko natančnostjo, vendar se na mestih ničel v diskretni mreži pojavi rahel zamik zaradi omejenega števila točk. Metoda streljanja prav tako ohranja osnovno sinusoido, a pri višjih nivojih so vidne manjše oscilacije v sredini intervala, kar je posledica končne tolerance sekantnega iskanja in numerične integracije.

3.2 Analiza napak za $n = 1$

Na Sliki 2 so prikazane absolutna, relativna in logaritemska absolutna napaka med numeričnimi in analitičnimi rešitvami za osnovno stanje $n = 1$.



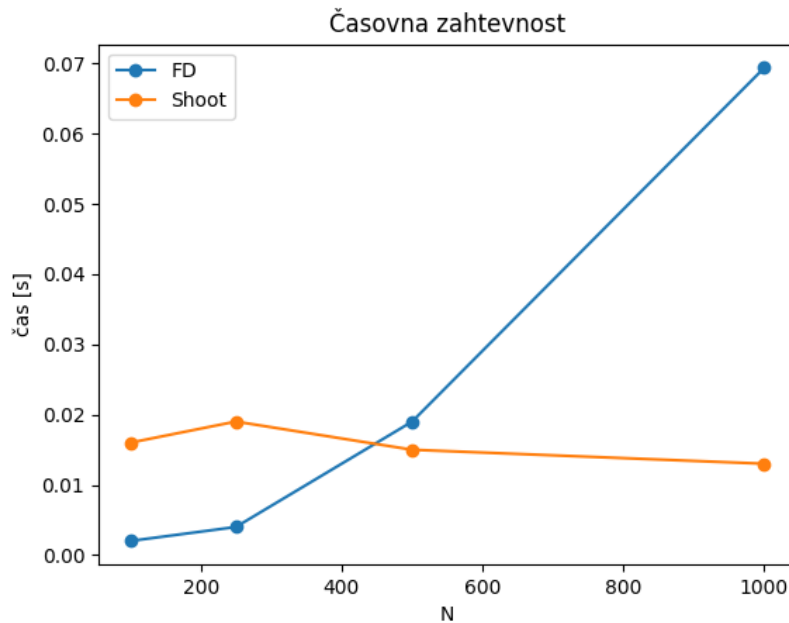
Slika 2: Absolutna (zgoraj), relativna (sredina) in logaritemska absolutna (spodaj) napaka za $n = 1$.

Za FD metodo absolutna napaka dosega vrednosti reda 10^{-16} do 10^{-15} , kar je blizu strojne natančnosti, medtem ko metoda streljanja dosega absolutno napako reda 10^{-4} do 10^{-3} , z največjimi

lokalnimi odstopanji v sredini jame. Relativna napaka pri FD je praktično nič, medtem ko pri shooting metodi lokalno presega enoto pri robovih, kjer je $\psi(x)$ blizu nič.

3.3 Časovna zahtevnost

Slika 3 prikazuje čas izvajanja obeh metod za različno število mrežnih točk N .

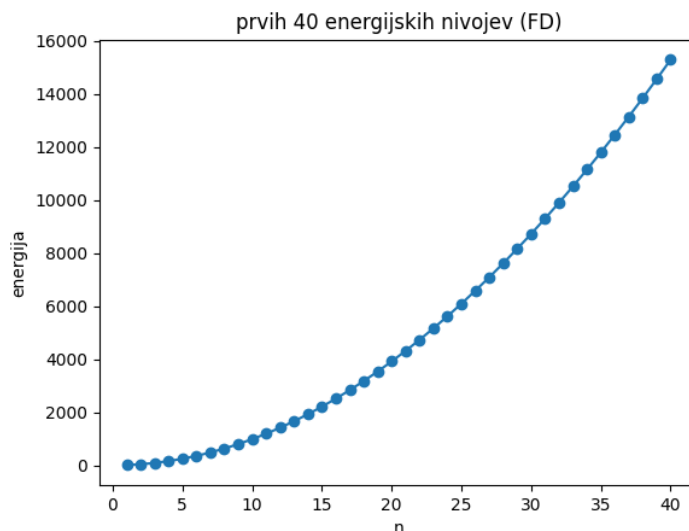


Slika 3: Časovna zahtevnost FD (modro) in shooting (oranžno) v odvisnosti od N .

Pri FD metodi čas raste približno kvadratno z N , saj diagonalizacija tridiagonalne matrike potrebuje $\mathcal{O}(N)$ operacij, vendar dodatni stroški upravljanja s podatki v Pythonu vodijo v opazno naraščanje. Shooting metoda integrira en IVP na nivo, zato njen čas izvajanja ostaja skoraj neodvisen od N , dokler se mreža ne postane izjemno fina.

3.4 Energijski nivoji

Na Sliki 4 so prikazane vrednosti prvih 40 energijskih nivojev, dobljenih z FD metodo.



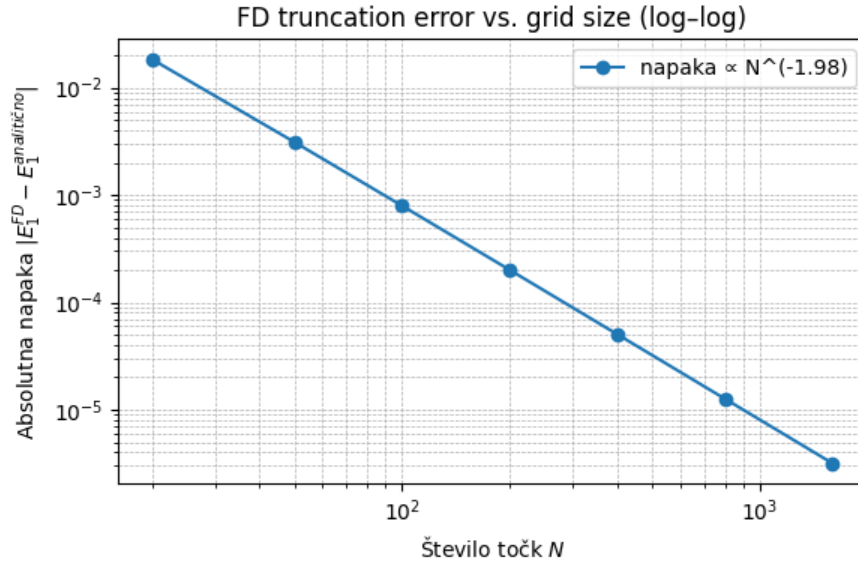
Slika 4: Prvih 40 energijskih nivojev iz FD metode.

Numerične vrednosti sledijo odvisnosti $E_n \propto n^2$ z linearno konstanto $(\pi/L)^2$, kar potrjuje ujemanje s teorijo.

4 Dodatna naloga: končna jama in analiza FD napak

Pri končni potencialni jami je potencial zunaj intervala $[-a/2, a/2]$ enak V_0 , kar pomeni Robinov robni pogoj na robu intervala: linearna kombinacija $\psi(a/2)$ in $\psi'(a/2)$ mora biti enaka nič. Prilagoditev strelske metode za ta pogoj zahteva le zamenjavo funkcije za merjenje robnega odstopanja, medtem ko diskretna matrika FD pridobi dodaten diagonalni člen $V(x)$.

Najpomembnejši vir napake v FD metodi sem ocenil tako, da sem za osnovno energijo E_1 izračunal absolutno razliko do analitične vrednosti kot funkcijo N in grafično prikazal v log-log skali (Slika 5). Nagib približno -1.98 potrjuje, da trunkacijska napaka aproksimacije drugega odvoda dejansko konvergira kot h^2 (ker $N^{-2} \propto h^2$). S tem sem potrdil, da ne sama dimenzija matrike, temveč natančnost diferencne formule ($\mathcal{O}(h^2)$) določa glavno napako FD metode; šele pri zelo velikih N lahko zaokrožitve na stroju postanejo opazne.



Slika 5: Absolutna razlika energije $|E_1^{FD} - E_1^{analitično}|$ kot funkcija N v log–log skali. Nagib ≈ -1.98 potrjuje $\mathcal{O}(h^2)$.

5 Zaključek

V poročilu sem prikazal, da FD metoda, čeprav časovno zahtevnejša pri velikih N , doseže strojno natančnost za osnovna stanja, saj je njen glavni vir napake trunkacijska $\mathcal{O}(h^2)$ aproksimacija. Shooting metoda je hitrejša in bolj fleksibilna pri zapletenih potencialih, vendar njena natančnost zavisi od izbire integratorja in tolerance. Pri analizi FD napake sem potrdil, da velikost matrike sama po sebi ni primarni vir napake – tisti je diskretna formula drugega odvoda.