Matematično fizikalni seminar

Robni problem lastnih vrednosti

Teodor Jovanovski, 28241125
Profesor: doc. dr. Miha Muškinja
Maj, 2025

1 Uvod

Pri robnem problemu lastnih vrednosti poznamo diferencialno enačbo in nekaj robnih pogojev (običajno vsaj toliko, kolikor je red enačbe) Za rešitev problema moramo v splošnem v enem zamahu določiti tako (lastne) funkcije, ki ustrezajo danim robnim pogojem, kot (lastne) vrednosti, ki skupaj zadoščajo diferencialni enačbi. Reševanje robnih problemov je zato lahko bistveno bolj zapleteno kot integracija začetnih problemov.

Numerično bomo reševali stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

za neskončno potencialno jamo ($V(0 < x < a) = 0$ na intervalu $[0,a]$ (ker je lažje) ter (dodatno) za končno potencialno jamo na intervalu $[-a/2, a/2]$ ($V(|x| \geq a/2) = V_0$), za kateri poznamo analitične rešitve; glej Strnad, *Fizika II*. Dva značilna pristopa, diferenčna metoda in strelska metoda, nas bosta pripravila na resnejše probleme, za katere analitičnih rešitev ne poznamo.

Pri *diferenčni metodi* razdelimo interval $[0,a]$ na N točk ($x_i = 0 + a/N \cdot i$) ali interval $[-a/2, a/2]$ na N točk ($x_i = -a/2 + a/N \cdot i$) in prepišemo drugi krajevni odvod v drugo diferenco, tako da ima brezdimenzijska enačba obliko

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

oziroma

$$\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1} = \lambda\psi_i \; ,$$

kjer je $\lambda = -Eh^2 = k^2h^2$ (na faktor $\frac{\hbar^2}{2m}$ lahko tudi pozabimo). Diskretizirati je treba tudi robna pogoja pri $x = 0$ in $x = a$ (ali $x = -a/2$ in $x = a/2$), ki sta v splošnem (in tudi pri končni jami) mešanega tipa,

$$\begin{aligned} c_1\psi_0 + c_2\frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} &= 0 \; , \\ d_1\psi_N + d_2\frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2h} &= 0 \; , \end{aligned}$$

medtem ko sta pri neskončni jami preprostejša, $\psi_0 = \psi_N = 0$. V primerih potencialnih jam tako dobimo tridiagonalni sistem N oziroma $N-1$ linearnih enačb

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

za lastne vektorje $\vec{\psi}$ in lastne vrednosti λ, ki ga rešujemo z diagonalizacijo.

Pri *strelski metodi* 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 (torej λ) diferencialno enačbo s poljubno integracijsko shemo (npr. RK4) integriramo do roba $x = a/2$ in tam preverimo, ali je izpolnjen drugi robni pogoj, $\psi(a/2) = 0$. Vrednost E (λ) spreminjamo tako dolgo, dokler robni pogoj ni izpolnjen do zahtevane natančnosti, in tako dobimo sode in lihe rešitve enačbe skupaj z ustreznimi lastnimi vrednostmi energije.

Naloga: Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja. Primerjaj natančnost rezultatov z analitičnimi rešitvami v odvisnosti od relavantnih parametrov (e.g. število točk N na mreži).

Dodatna naloga: Problem končne jame je s strelsko metodo le trivialna posplošitev problema neskončne jame: spremeni se le robni pogoj pri $x = a/2$, ki ima zaradi zahteve po zveznosti in zvezni odvedljivosti valovne funkcije zdaj obliko $c_1\psi(a/2) + c_2\psi'(a/2) = 0$. Enostavneje, streljate lahko od $x = 0$ (sredina intervala) do 'neskončno', torej do dovolj velike razdalje, kjer je vrednost valovne funckije enaka nič ($\psi(\infty) = 0$). Kaj ima pri diferenčni metodi večjo vlogo pri napaki: končna natančnost diference, s katero aproksimiramo drugi odvod, ali zrnatost intervala (končna razsežnost matrike, ki jo diagonaliziramo)?

2 Neskončna potencialna jama

V tem delu sem najprej poiskal analitične rešitve za lastne energije in lastne funkcije. Za to sem uporabil vgrajene metode programa MATLAB. Za lažje numerično računanje sem postavil $\hbar = 1$ in $m = 0,5$. Širina jame je bila $a = 1$. Schrödingerjeva enačba se potem glasi (ali ima obliko):

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E_{\mathrm{num}}.$$

Za simulacijo z diferenčno metodo, ang. *Final differences method* (FDM), sem izbral število intervalov $N = 100$. Algoritem je sledil navodilom, zapisanim v uvodu.

Pri strelski metodi je bila enačba pretvorjena v sistem dveh diferencialnih enačb prvega reda:

1. $$\frac{\mathrm{d}^1 y_1}{\mathrm{d}x^1} = y_2$$
2. $$\frac{\mathrm{d}^1 y_2}{\mathrm{d}x^1} = -E_{\mathrm{num}} \cdot y_1$$

Po nastavitvi začetnih pogojev je bil sistem rešen z uporabo vgrajenih metod programa MATLAB. Ko je bila najdena vrednost $\psi(a)$ dovolj blizu nič, je bila z metodo *ode45* pridobljena celotna lastna funkcija, ki je bila nato normirana.

Rezultati

Prve štiri lastne vrednosti energije, izračunane z metodo FDM (pri N=100) in strelsko metodo, so primerjane z analitičnimi vrednostmi v Tabeli 1.

Tabela 1: Primerjava izračunanih lastnih vrednosti energije (E_{fiz}) z analitičnimi vrednostmi.

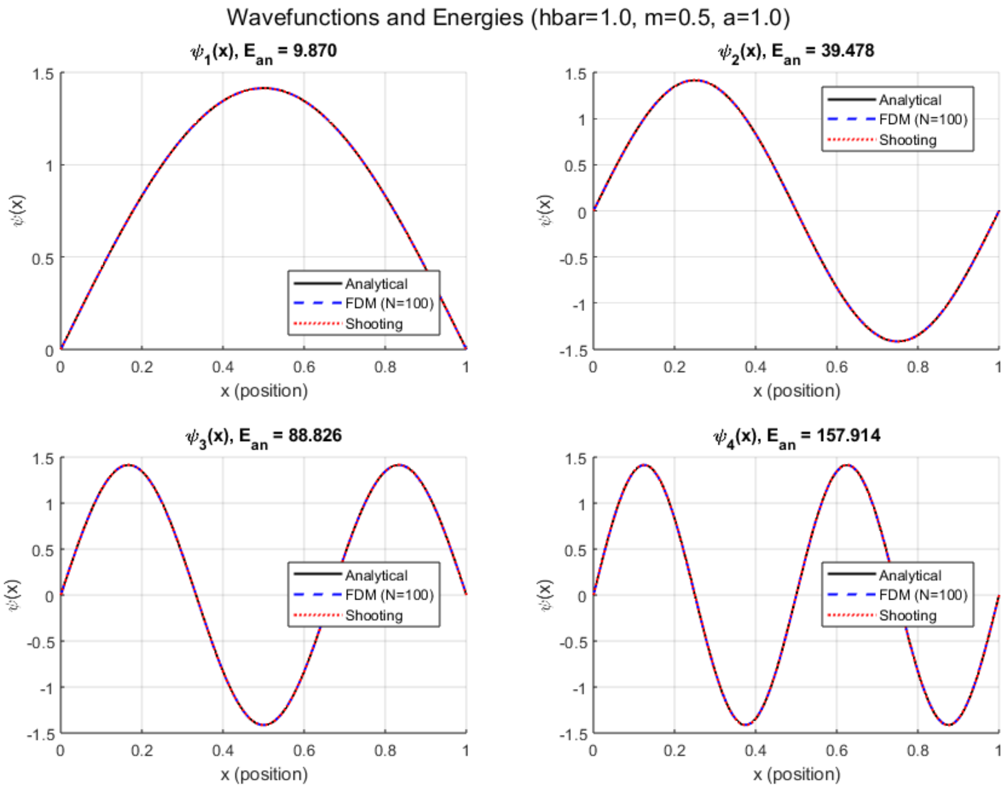
n	Analitična E	E (FDM, N=100)	Napaka (FDM)	E (strelska)	Napaka (strelska)
1	9,869.604	9,868.793	−8,12e−4	9,869.604	3,12e−9
2	39,478.418	39,465.431	−1,30e−2	39,478.418	−5,49e−9
3	88,826.440	88,760.708	−6,57e−2	88,826.440	−9,85e−9
4	157,913.670	157,705.974	−2,08e−1	157,913.670	−2,20e−8

Natančnost diferenčne metode v odvisnosti od N

Natančnost diferenčne metode za energijo osnovnega stanja (E_1) je bila preučena s spreminjanjem števila intervalov N. Rezultati so povzeti v Tabeli 2.

Tabela 2: Natančnost energije osnovnega stanja (E_1) z diferenčno metodo v odvisnosti od števila intervalov N.

N	E_1 (FDM)	Abs. napaka (E_1)	Rel. napaka
20	9,849.328	−2,027.7e−2	−2,05e−3
50	9,866.358	−3,246.5e−3	−3,29e−4
100	9,868.793	−8,117.2e−4	−8,22e−5
200	9,869.401	−2,029.3e−4	−2,06e−5
500	9,869.572	−3,246.9e−5	−3,29e−6



Slika 1: Grafi na splošno kažejo odlično ujemanje med obema numeričnima metodama in analitičnimi rešitvami, še posebej za nižja energijska stanja.

Z naraščanjem N (in posledično zmanjševanjem koraka $h = a/N$) se absolutne in relativne napake zmanjšujejo. To je skladno s pričakovano konvergenco napake reda $O(h^2) = O(1/N^2)$ za uporabljeno aproksimacijo.

Natančnost strelske metode v odvisnosti od relativne tolerance

Natančnost strelske metode za energijo osnovnega stanja (E_1) je bila preučena s spreminjanjem relativne tolerance (‘RelTol‘) metode ‘ode45‘. Rezultati so prikazani v Tabeli 3.

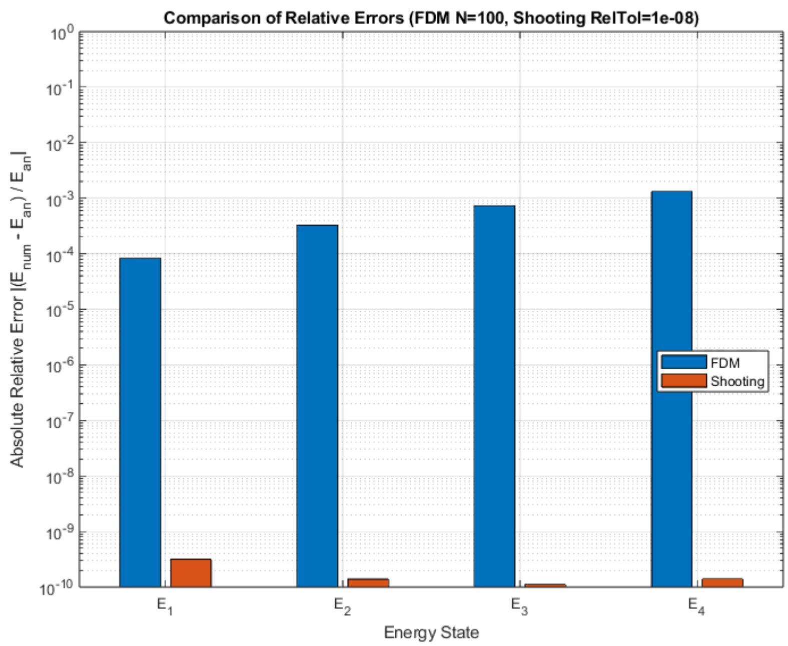
Tabela 3: Natančnost energije osnovnega stanja (E_1) s strelsko metodo v odvisnosti od ‘RelTol‘.

‘RelTol‘	E_1 (strelska)	Abs. napaka (E_1)	Rel. napaka	Koraki ODE
1,0e−4	9,869.596	−7,953.6e−6	−8,06e−7	53
1,0e−6	9,869.604	−3,811.6e−7	−3,86e−8	85
1,0e−8	9,869.604	−1,371.7e−9	−1,39e−10	201
1,0e−10	9,869.604	−4,075.0e−12	−4,13e−13	489
1,0e−12	9,869.604	2,948.8e−13	2,99e−14	1225

Zmanjšanje ‘RelTol‘ znatno izboljša natančnost izračuna energije. To pa prinaša strošek večje računske zahtevnosti, kar kaže večje število korakov, ki jih potrebuje metoda ‘ode45‘.

Primerjava relativnih napak

Slika 2 prikazuje diagram, ki primerja absolutne relativne napake $|(E_{\text{numerična}} - E_{\text{analitična}})/E_{\text{analitična}}|$ za prva štiri energijska stanja, pri čemer je bila za diferenčno metodo uporabljena vrednost N=100, za strelsko metodo pa ‘RelTol‘ $= 1 \times 10^{-8}$.



Slika 2: Primerjava absolutnih relativnih napak za izračunane energije z diferenčno metodo (N=100) in strelsko metodo (‘RelTol‘$=1 \times 10^{-8}$). Za izbrane parametre strelska metoda dosega znatno manjše relativne napake v primerjavi z diferenčno metodo. Relativna napaka pri diferenčni metodi narašča z višjimi energijskimi stanji.

Graf na splošno kaže, da za izbrane parametre strelska metoda dosega znatno manjše relativne napake za lastne energije v primerjavi z diferenčno metodo pri N=100. Relativna napaka pri diferenčni metodi se povečuje pri višjih energijskih stanjih, kar je pričakovano, saj imajo višja stanja več oscilacij in jih je težje aproksimirati s fiksno velikostjo mreže.

3 Zaključek

Problem enodimenzionalne neskončne potencialne jame je bil uspešno numerično rešen z uporabo metode končnih diferenc in strelske metode. Izračunane lastne energije in lastne funkcije so pokazale dobro ujemanje z analitičnimi rešitvami.

Natančnost diferenčne metode se, kot pričakovano, spreminja s številom mrežnih točk N. Natančnost strelske metode je močno odvisna od nastavitev tolerance metode ODE in lahko doseže visoko natančnost. Za preizkušene parametre je strelska metoda na splošno dala natančnejše lastne vrednosti energije kot diferenčna metoda pri N=100.

Obe metodi sta dragoceni orodji za reševanje kvantnomehanskih robnih problemov. Razumevanje njunih prednosti, slabosti in značilnosti napak je ključno za njihovo učinkovito uporabo pri bolj zapletenih sistemih, kjer analitične rešitve morda niso na voljo.