08 - ROBNI PROBLEM LASTNIH VREDNOSTI

Matematično-fizikalni praktikum, avgust 2024
Luka Skeledžija, 28201079

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 Schrodingerjevo enačbo

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

za neskončno potencialno jamo ($V(-a/2 < x < a/2) = 0$ in $V(|x| \geq a/2) \to \infty$) ter za končno potencialno jamo ($V(|x| \geq a/2) = V_0$), 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 $[-a/2, a/2]$ na N točk ($x_i = -a/2 + ia/N$) 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

$$\psi_{i-1} - (2-\lambda)\psi_i + \psi_{i+1} = 0\ ,$$

kjer je $\lambda = Eh^2 = k^2h^2$. Diskretizirati je treba tudi robna pogoja pri $x = -a/2$ 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

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

za lastne vektorje $\underline{\psi}$ 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 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 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.

2. Neskončna potencialna jama

Neskončno potencialno jamo lahko rešimo analitično. Imamo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi,$$

z robnima pogojema $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$. Račun je malce lažji, če jamo premaknemo za $a/2$ in dobimo nov rob na $x = 0$ in $x = 1$. Diferencialno enačbo ob pogoju $E > 0$ reši nastavek

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx),$$

kjer je $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Če upoštevamo robni pogoj pri $x = 0$, dobimo $B = 0$, za $x = a$ pa dobimo $A\sin(kx)$. Sledi, da je $k_n = \frac{n\pi}{a}$, kjer je $n \in \mathbb{N}$. Lastne energije lahko tedaj izrazimo kot:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2.$$

Konstanto A izrazimo s pomočjo pogoja normalizacije

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi(x)|^2 dx = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

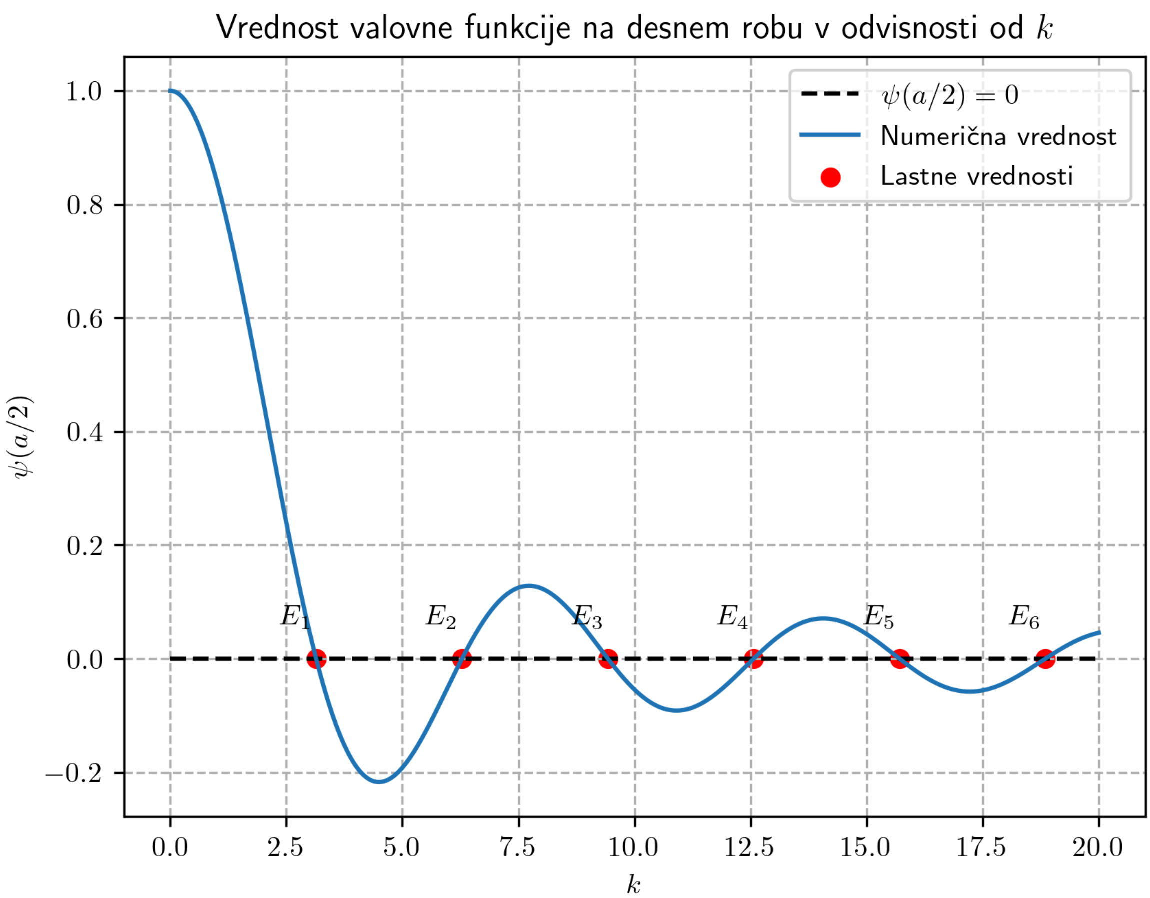
Lastne funkcije so torej:

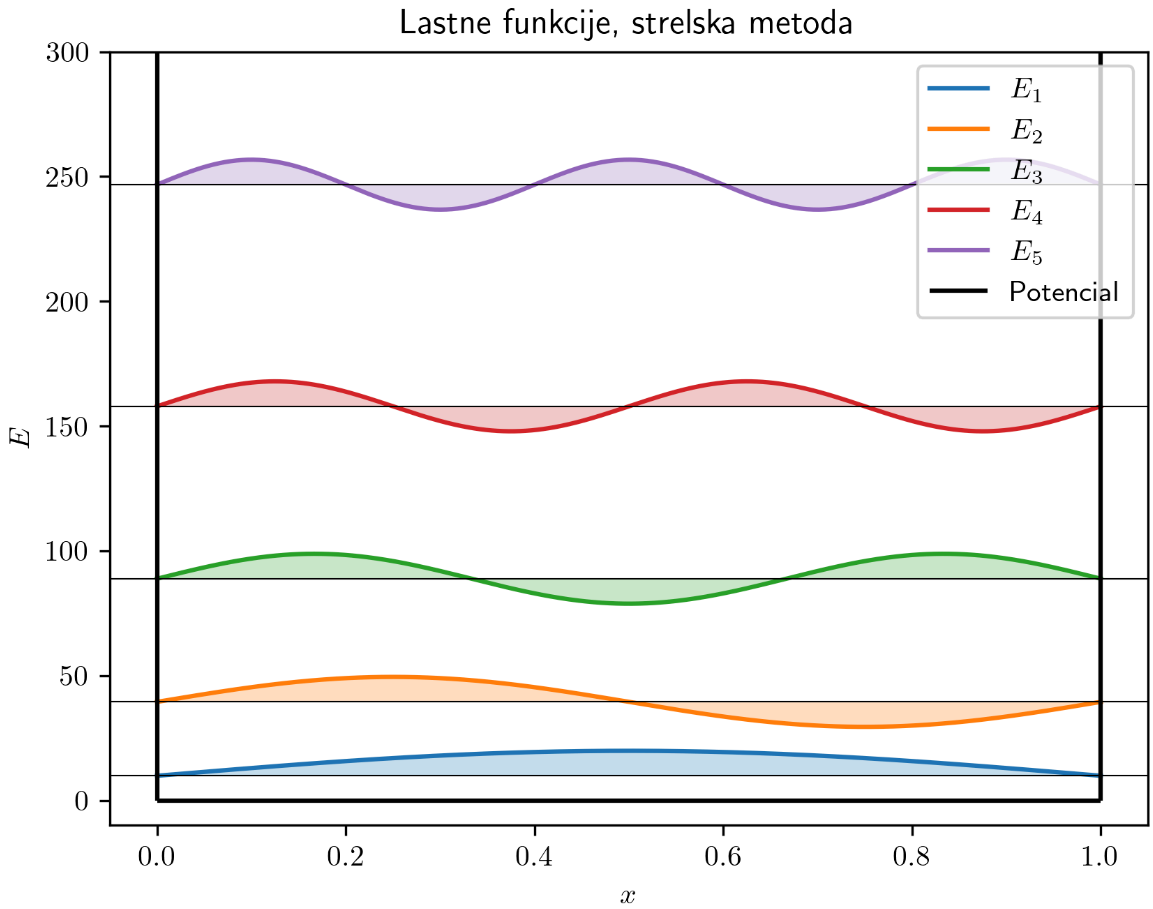
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

Lastne funkcije bomo v nadaljevanju poiskali numerično s pomočjo dveh različnih metod, in sicer diferenčne metode in metode streljanja.

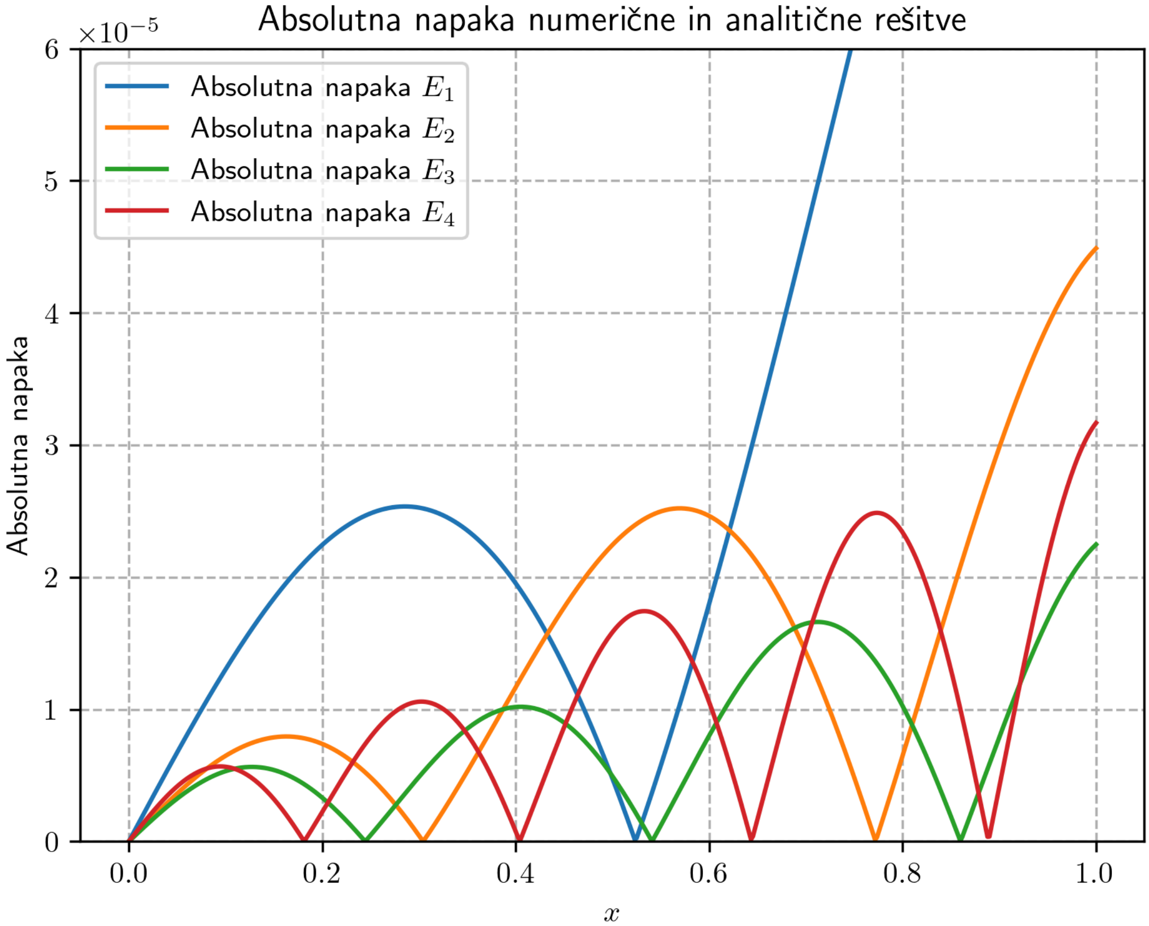
2.1. Strelska metoda

Pri strelski metodi robni problem (Boundary Value Problem - BVP) prevtorimo v problem začetne vrednosti (Initial Value Problem - IVP), kjer iščemo optimalni $\psi'(a)$ za dane robne pogoje. Najprej rešimo IVP z oceno odvoda in ga nato iterativno prilagajamo dokler ne dobimo vrednosti, ki zadovoljuje $\psi(a/2, k) = 0$ za $E = k^2$.





Opazimo, da se napaka rešitve sistematično veča. Največje odstopanje dobimo ravno na koncu intervala.



2.1. Diferenčna metoda

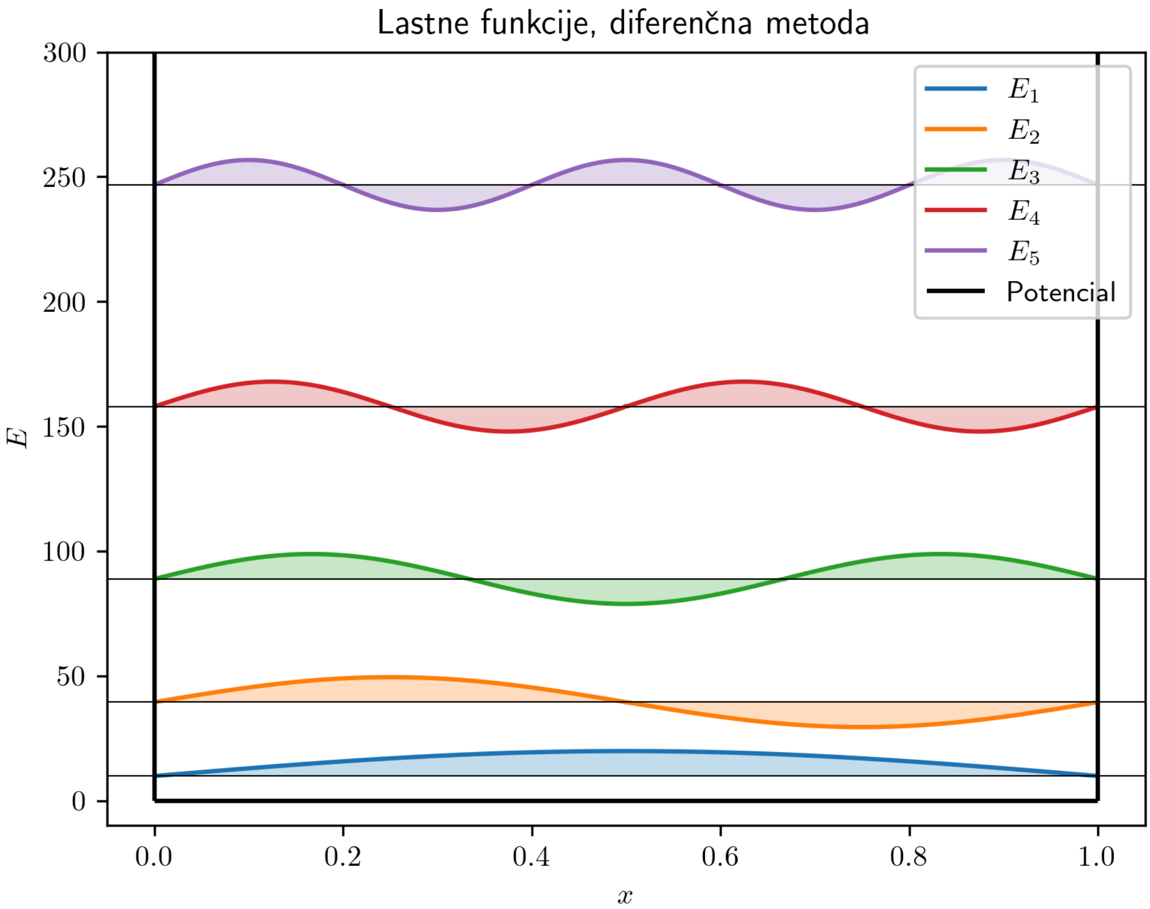
Pri diferenčni metodi Schrodingerjevo enačbo prepišemo v sledečo obliko

$$-\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + V(x_i)\psi_i = E\psi_i,$$

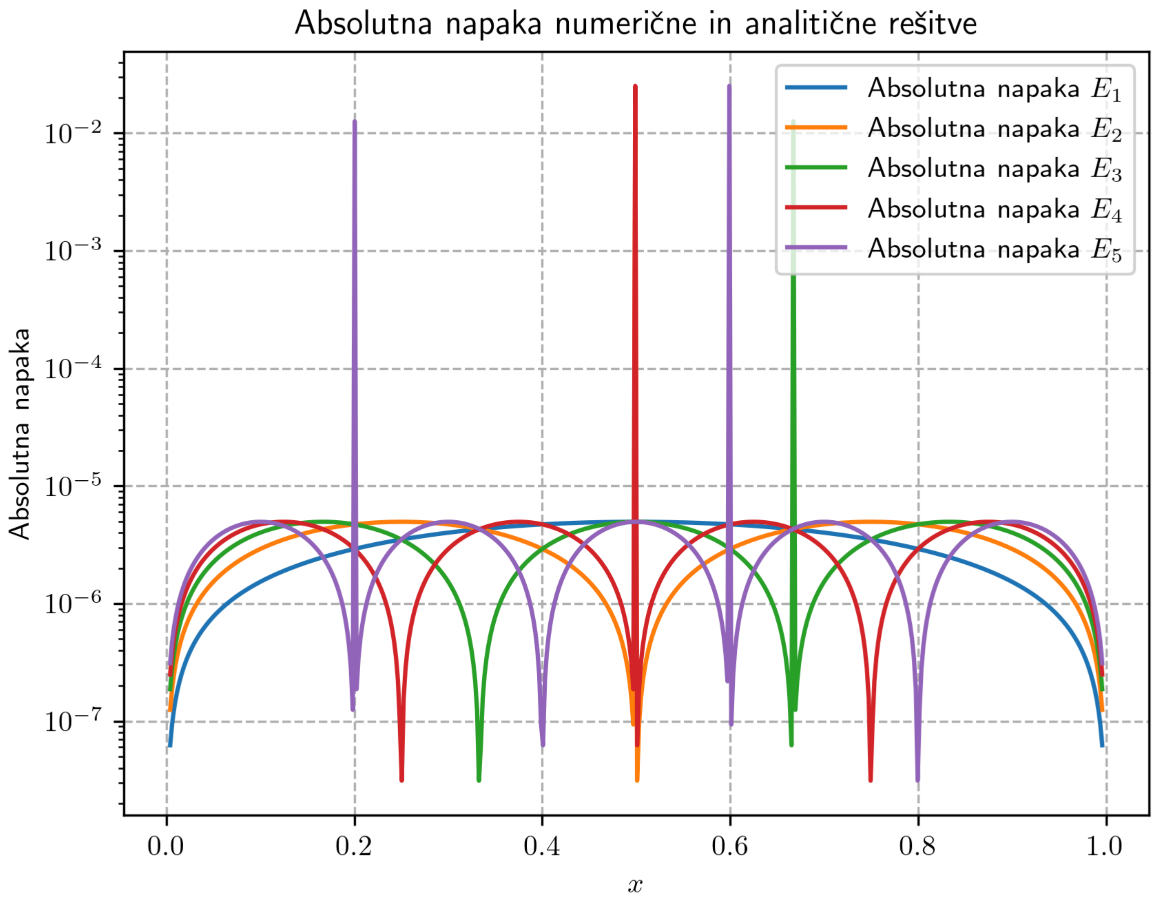
ki jo lahko razpišemo v sistem linearnih enačb oblike $A\psi = E\psi$, kjer je A sledeča tridiagonalna matrika:

$$A = -h^{-2}\begin{bmatrix} -2 - h^2V(x_1) & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 - h^2V(x_2) & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 - h^2V(x_{N-1}) \end{bmatrix}.$$

Za nas velja $V = 0$. Lastne vrednosti in vektorje smo poiskali z metodo `numpy.linalg.eig`.

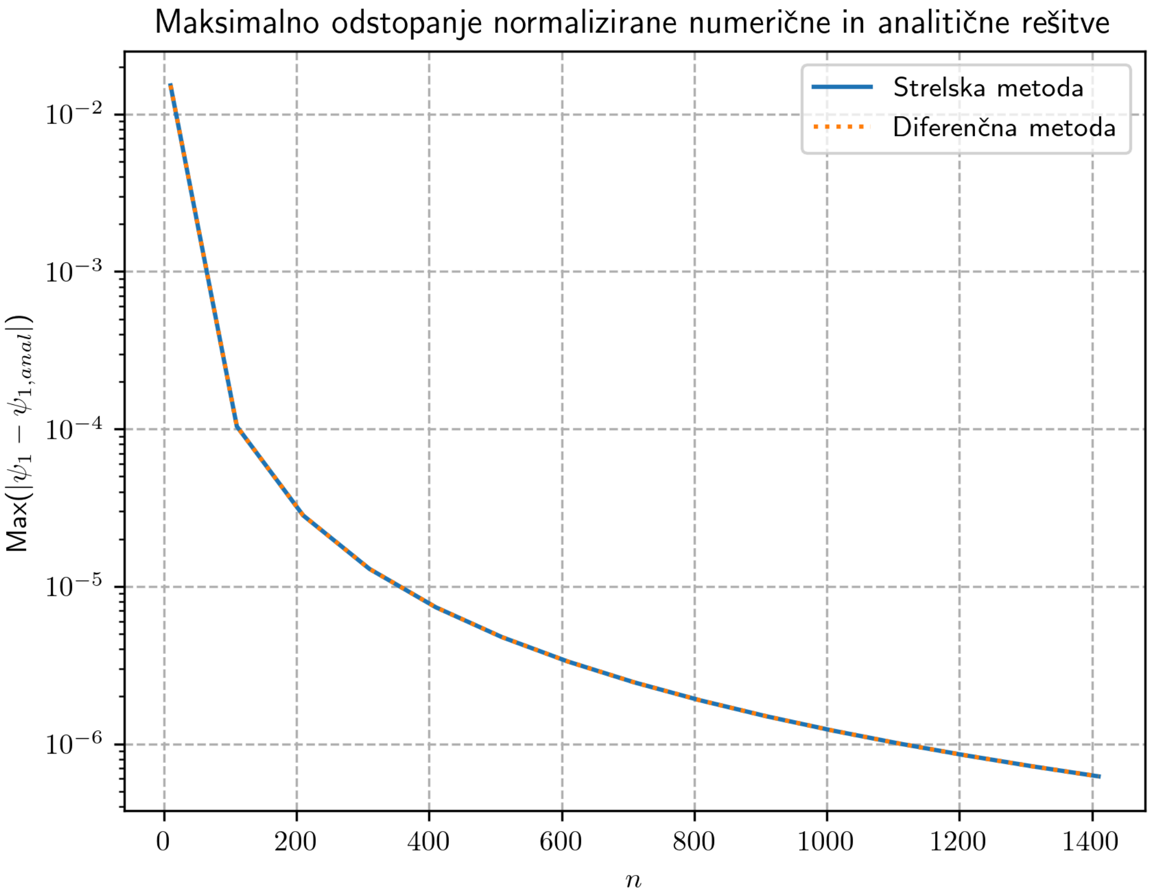


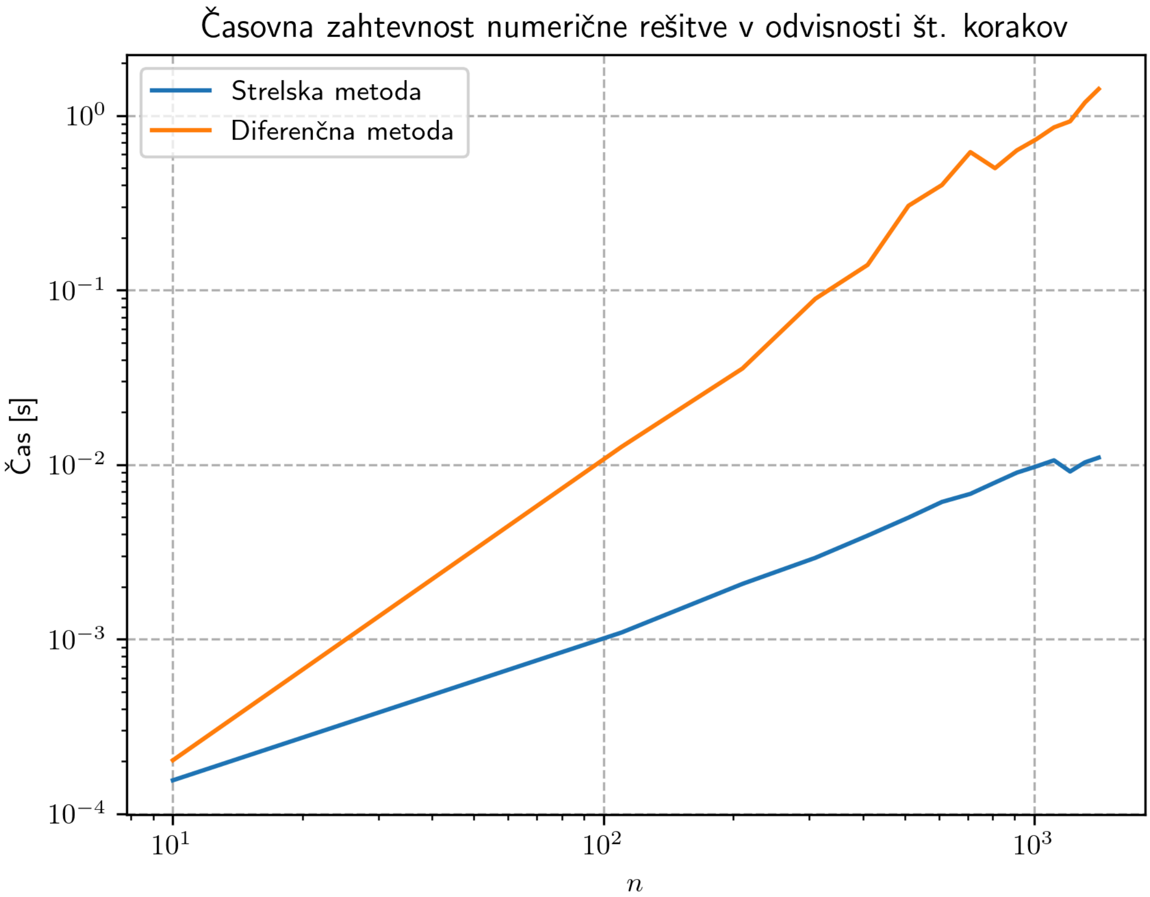
Za razliko od strelske metode, tukaj napaka ostaja pod določeno mejo. Največje odstopanje je v ničlah višjih energij.



2.1. Primerjava metod

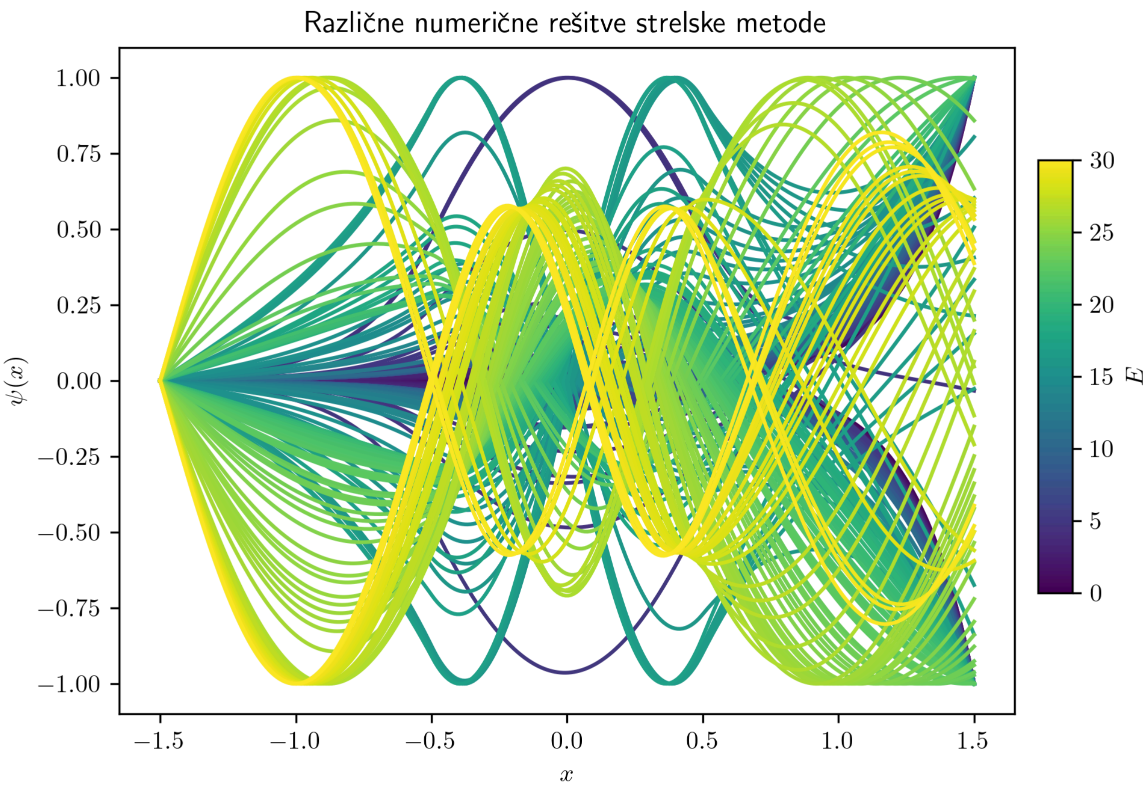
Sedaj primerjamo dve metodi po hitrosti in natančnosti glede na število korakov. Opazimo, da imata oba algoritma shematsko podobno odvisnost napake od velikosti koraka. Le da je eden pri delovanju precej počasnejši (in po mojem tudi spominsko precej zahtevenjši, na sploh je bila ta primerjava čudna...).

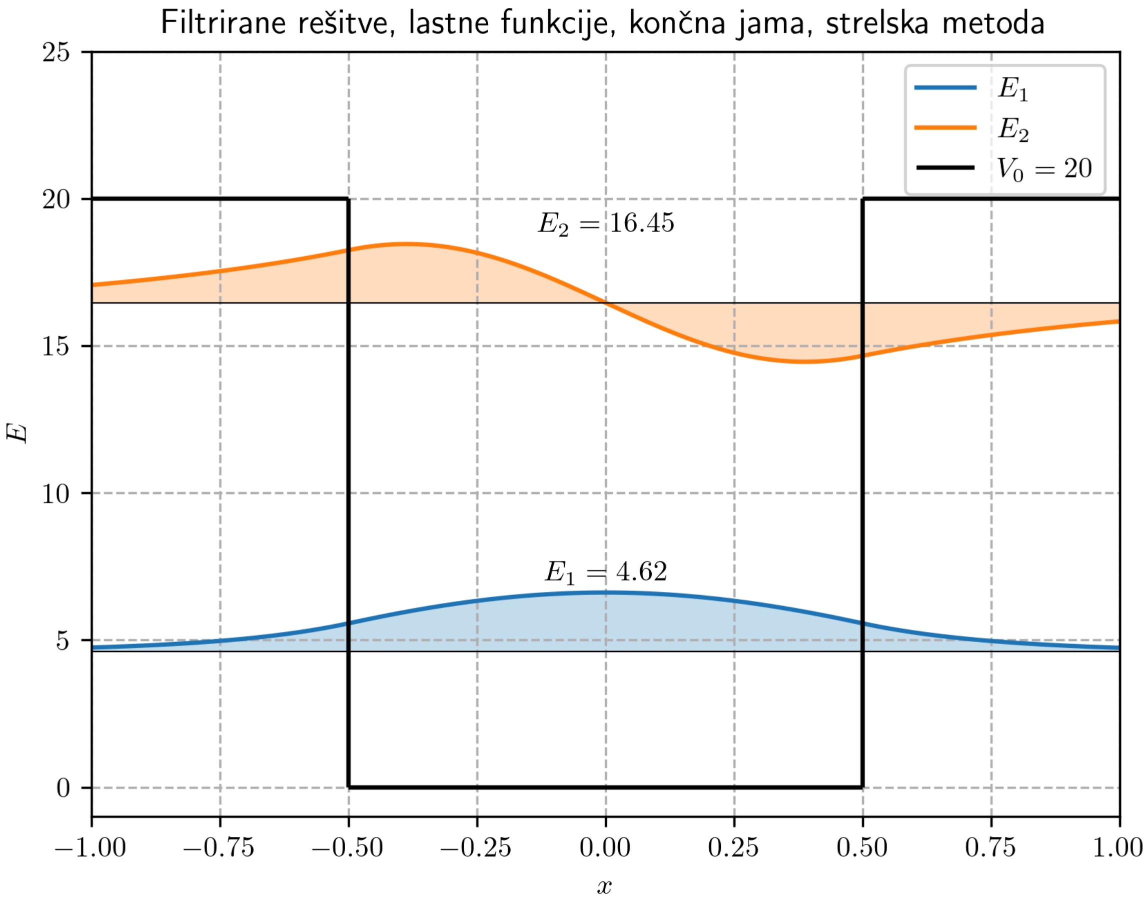




3. Končna potencialna jama

Sedaj smo razvili potrebno podlago, da se lotimo primerov, kjer analitične rešitve ne poznamo. (Čeprav analitične rešitve končne potencialne jame poznamo in so kombinacije trigonometričnih in eksponentnih funkcij). Vendar bomo problem v nadaljevanju rešili numerično - s strelsko metodo. Težava nastane, ker so robni pogoji sedaj tudi odvisni od lastne vrednosti - posledično jih je potrebno za vsako rešitev preveriti. Kar v grobem spominja na brute-force pristop ugibanja pravih parametrov. Spodaj prikažemo množico rešitev, ki jih dobimo z iteriranjem spremenljivk. Rešitve nato filtriramo in gledamo, katere najbolj ustrezajo našim robnim pogojem. Ti dve rešitvi tudi izrišemo.





4. Zaključek

Pri tej nalogi smo preučili dva numerična pristopa za reševanje robnega problema lastnih vrednosti na primeru Schrödingerjeve enačbe za potencialno jamo. Strelska metoda se je izkazala za intuitivno, a občutljivo na sistematične, medtem ko je diferenčna metoda kljub računski zahtevnosti zagotovila rešitve brez sistematične napake. Oba pristopa sta nam dala dobro podlago za numerično reševanje problemov, kjer analitične rešitve niso vedno na voljo. Na koncu smo uspešno razširili analizo na primer končne potencialne jame, kjer smo potrdili uporabnost metod tudi v bolj kompleksnih scenarijih.

Luka Skeledžija, Github source 🔗 , 2024