

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

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

gdzie:

- $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ to położenie cząstki,
- Ω to dziedzina równania, $\Omega = \{(x, y) \mid -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \text{ oraz } -\frac{L}{2} \leq y \leq \frac{L}{2}\}$,
- $\psi(x, y)$ 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:

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

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

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

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 znalezione przez sieć neuronową
- Wykres konturowy funkcji błędu względnego L_2 : $|\psi(x) - \hat{\psi}(x)|^2$.

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