

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Институт математики, физики и информационных технологий
Кафедра «Прикладная математика и информатика»

01.03.02 ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

СИСТЕМНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

на тему: Реализация численных алгоритмов расчета спектра оператора Штурма – Лиувилля с коэффициентами, имеющими компактный носитель

Студентка _____ К.В. Волгутова _____

Руководитель _____ д. ф.–м. н., доцент С.В.Талалов _____

Допустить к защите

Заведующий кафедрой к.тех.н, доцент, А.В. Очеповский _____

« _____ » _____ 20 _____ г.

Тольятти 2016

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Институт математики, физики и информационных технологий
Кафедра «Прикладная математика и информатика»

УТВЕРЖДАЮ
Зав.кафедрой «Прикладная
математика и информатика»
_____ А.В.Очеповский

« ____ » _____ 2016 г.

ЗАДАНИЕ
на выполнение бакалаврской работы

Студент Волгутова Кристина Владимировна

1. Тема: Реализация численных алгоритмов расчета спектра оператора Штурма – Лиувилля с коэффициентами, имеющими компактный носитель.
2. Срок сдачи студентом законченной выпускной квалификационной работы 23.05.2016 г.
3. Исходные данные к выпускной квалификационной работе: набор функций, задающих коэффициенты оператора Штурма – Лиувилля.
4. Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов, разделов):
 - 1) Реализация численных алгоритмов расчета дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля.
 - 2) Разработка способов улучшения эффективности применяемых численных алгоритмов и реализация усовершенствованных алгоритмов для расчета спектра оператора Штурма – Лиувилля.
 - 3) Постановка выводов и заключений о проделанной работе.
5. Ориентировочный перечень графического и иллюстративного материала: презентация, графики, таблицы.
6. Дата выдачи задания « 11 » января 2016 г.

Руководитель выпускной
квалификационной работы

_____ С. В. Талалов

Задание принял к исполнению

_____ К. В. Волгутова

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Институт математики, физики и информационных технологий
Кафедра «Прикладная математика и информатика»

УТВЕРЖДАЮ
Зав.кафедрой «Прикладная
математика и информатика»
_____ А.В.Очеповский

«_____» _____ 2016 г.

**КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН
выполнения бакалаврской работы**

Студента Волгутовой Кристины Владимировны
по теме Реализация численных алгоритмов расчета спектра оператора Штурма
– Лиувилля с коэффициентами, имеющими компактный носитель

Наименование раздела работы	Плановый срок выполнения раздела	Фактический срок выполнения раздела	Отметка о выполнении	Подпись руководителя
Постановка целей и задач	11.01.16-18.01.16	11.01.16-18.01.16	выполнено	
Поиск и изучение необходимой литературы	19.01.16-15.02.16	19.01.16-17.02.16	выполнено	
Реализация кода программ	16.02.16-27.03.16	18.02.16-31.03.16	выполнено	
Усовершенствование кода программ	28.03.16-19.04.16	01.04.16-21.04.16	выполнено	
Составление графического материала	20.04.16-27.04.16	22.04.16-29.04.16	выполнено	
Анализ итоговых результатов	28.04.16-22.05.16	30.04.16-22.05.16	выполнено	
Демонстрация работы	23.05.16	23.05.16	выполнено	
Предварительная защита	24.05.16	24.05.16	выполнено	
Корректировка согласно сделанным замечаниям	25.05.16	25.05.16	выполнено	
Проверка в системе «Антиплагиат.ВУЗ»	30.05.2016	30.05.2016	выполнено	
Сдача пояснительной записки	31.05.2016	31.05.2016	выполнено	

Руководитель выпускной
квалификационной работы

_____ С.В. Талалов

Задание принял к исполнению

_____ К. В. Волгутова

Аннотация

Целью данной работы является разработка, программная реализация и совершенствование алгоритмов поиска решения уравнения Штурма – Лиувилля с ограниченным потенциалом, имеющим компактный носитель. Был изучен и реализован численный алгоритм расчета спектра оператора Штурма – Лиувилля, основанный на методе “стрельбы”. Далее осуществляется выбор и описание способа усовершенствования эффективности метода “стрельбы”, проводится вычислительный анализ для поиска дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля с различными коэффициентными функциями.

Структура работы состоит из введения, двух глав, заключения, списка используемых источников.

В данной выпускной бакалаврской работе использовано 32 рисунка, 1 таблица, 20 источников литературы и 5 приложений. Общее количество страниц выпускной квалификационной работы 41.

Оглавление

Введение.....	6
Глава 1 Общие теоретические сведения.....	9
1.1 Уравнение Штурма – Лиувилля и области его применения.....	9
1.2 Решение уравнения Штурма – Лиувилля в общем виде для простейших кусочно-постоянных функций	14
1.3 Поиск дискретного спектра с учетом четности и нечетности.....	17
Глава 2 Алгоритм вычисления дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля	22
2.1 Описание метода “стрельбы”	22
2.2 Улучшение эффективности метода “стрельбы”	26
2.3 Реализация в среде MatLab.....	29
2.4 Замечания.....	33
2.5 Проведение численного эксперимента.....	36
Заключение.....	39
Список используемой литературы.....	40
Приложение А Графическое решение трансцендентного уравнения для четного случая.....	42
Приложение Б Графическое решение трансцендентного уравнения для нечетного случая.....	43
Приложение В Поиск спектра с кусочно-постоянной аппроксимацией	44
Приложение Г Поиск спектра с кусочно-непостоянной аппроксимацией	47
Приложение Д Вычисление дискретного спектра для различных функций....	53

Введение

Изучение спектральных свойств дифференциальных операторов (см., например [4, 6]) является важной задачей, имеющей многочисленные практические приложения [10, 12]. Одним из дифференциальных операторов, используемых в приложениях наиболее часто – это оператор Штурма – Лиувилля [8] вида:

$$\hat{L} = -\frac{\partial^2}{dx^2} + P(x), \quad (1)$$

где $P(x)$ – функция, свойства которой могут зависеть от конкретной задачи. В настоящей работе мы рассматриваем оператор $\hat{L}$, как оператор в гильбертовом пространстве $L_2(R)$, а функцию $P(x)$ – “потенциал” – как функцию со свойствами:

- 1) $P(x): \exists M > 0 \ |P(x)| \leq M$;
- 2) $\text{supp } P(x)$ – компактное множество,
 $\text{supp } P(x) = \{x: P(x) \neq 0\}$.

Цель: Реализация алгоритма для численного расчета дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля с коэффициентами, имеющими компактный носитель и разработка методов улучшения эффективности реализованного алгоритма. В основу реализованного алгоритма положен метод “стрельбы”.

Для достижения поставленной цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Выбор и обоснование метода для улучшения эффективности расчета спектра.
2. Выбор языка программирования и среды разработки для реализации программного продукта, осуществляющего численное решение спектральной задачи Штурма – Лиувилля.
3. Составление программного кода для осуществления поставленной цели.
4. Проведение численных экспериментов по расчету спектра с различными коэффициентными функциями.

Объект выпускной бакалаврской работы: спектральная задача Штурма – Лиувилля.

Предмет исследования: численные методы нахождения дискретного спектра уравнения Штурма – Лиувилля.

Актуальность работы: уравнение Штурма – Лиувилля широко применяется в различных областях физики, например, таких, как квантовая механика и волноводная оптоэлектроника. Более подробно приложения исследуемого уравнения будут рассмотрены в первой главе.

Следует также отметить, что явное решение спектральной задачи Штурма – Лиувилля, как правило, найти невозможно. Поэтому особую значимость представляет именно численное решение задачи [1, 7, 11]. Такие исследования по-прежнему актуальны: работы, посвященные численным методам нахождения спектра, продолжают появляться [3].

Выпускная бакалаврская работа состоит из введения, двух глав и заключения.

Во введении обосновывается актуальность данной работы, ставится цель и определяются задачи.

Первая глава содержит общую теоретическую часть, где приводятся основные сведения по заданной теме: рассматривается общий вид уравнения Штурма – Лиувилля, проводятся необходимые сведения из функционального анализа. В качестве примера решения спектральной задачи рассматривается поиск спектра для уравнения Штурма – Лиувилля на примере «одномерной потенциальной ямы» – простейшего случая кусочно-постоянной функции $P(x)$ (коэффициента оператора Штурма – Лиувилля).

Во второй главе происходит подробное описание алгоритма расчета спектра оператора Штурма – Лиувилля методом “стрельбы”, осуществляется выбор способов для улучшения эффективности данного алгоритма и реализация усовершенствованного алгоритма. Далее в текущей главе описывается техническая часть работы: как и с помощью чего реализован код программы. Рассматриваются различные функции и конструкции, которые

были использованы для осуществления поставленной цели. В ходе работы для наглядного представления данных приводятся различные графики и таблицы.

В заключении проводится анализ итоговых результатов, формируются окончательные выводы по рассматриваемой теме.

Программный код и все численные результаты в виде таблиц содержатся в приложении.

Глава 1 Общие теоретические сведения

1.1 Уравнение Штурма – Лиувилля и области его применения

Спектральная задача Штурма – Лиувилля:

$$Ly \equiv -\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + P(x)y = \lambda y, \quad (2)$$

где $\lambda = -k^2$ – спектральный параметр, рассматривается в данной работе как спектральная задача в Гильбертовом пространстве $L_2(R)$. Нам необходимо найти те значения параметра λ , при котором существуют решения уравнения (2), принадлежащие пространству $L_2(R)$. Такие значения называются собственными значениями (собственными числами). Совокупность собственных значений – спектр задачи, который может быть, как дискретным (собственные значения образуют дискретное множество), так и непрерывным (в противном случае). Как отмечалось во введении, коэффициентная функция $P(x)$ в нашем случае имеет свойства:

- 1) ограниченность: $P(x): \exists M > 0, |P(x)| \leq M$;
- 2) множество $\text{supp } P(x)$ – компактное множество.

Пространство $L_2(R)$ – пространство, элементами которого являются функции $y(x)$ (в данном случае решения спектральной задачи (2)) с интегрируемым квадратом:

$$L_2: \int_{-\infty}^{+\infty} |y(x)|^2 < \infty.$$

Что касается функции $P(x)$, то она может рассматриваться как элемент нормированных пространств L_2 и L_∞ . Поскольку мы будем использовать соответствующие нормы в дальнейшем, дадим здесь необходимые определения.

Пусть дано произвольное линейное пространство X . Это пространство будет являться нормированным пространством, если на множестве его элементов $x \in X$ определена вещественная функция $\|x\|$, называемая нормой и удовлетворяющая следующим аксиомам [14, 15]:

- 1) $\|x\| \geq 0, x \in X$;
- 2) $\|\lambda \cdot x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$;

3) Если $\|x\| = 0$, то $x = 0$;

4) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Пространство $L_2(R)$ – является нормированным пространством с нормой

$$\|y(x)\|_{L_2} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |y(x)|^2 dx}. \quad (3)$$

Пространство L_∞ – это пространство ограниченных функций. Норма в данном пространстве определяется следующим образом:

$$L_\infty: \|y(x)\|_{L_\infty} = \sup_{x \in R} |y(x)|.$$

Имея ввиду важность практических приложений, мы рассмотрим здесь более детально возникновение спектральной задачи Штурма – Лиувилля в квантовой механике и волноводной оптоэлектронике.

В квантовой механике уравнение Штурма – Лиувилля имеет смысл нерелятивистского уравнения Шредингера – основного уравнения квантовой механики [5]. Решением соответствующего уравнения является волновая функция, а поиск спектра оператора Штурма – Лиувилля несет смысл нахождения уровней энергии. Соответствующее Гильбертово пространство $L_2(R)$ имеет смысл пространства квантовых состояний системы. Нахождение решения уравнения Шредингера при различных условиях, различного вида коэффициентных функциях (потенциалах) продолжается оставаться актуальным и в настоящее время. В этой связи работы, посвященные его решению, продолжают появляться [16, 17].

Говоря о важности исследования спектральной задачи Штурма – Лиувилля (уравнения Шредингера), необходимо также отметить, что квантовая механика – это одно из самых перспективных научных направлений, которое, по-видимому, определит ИТ-технологии будущего. В книге [10] рассматриваются компьютеры принципиально нового типа – квантовые компьютеры, вычислительные процессы в которых происходят намного быстрее и эффективнее, чем на классических вычислительных машинах.

Квантовые компьютеры еще не до конца изучены учеными, поэтому нельзя утверждать, что абсолютно все задачи выполняются на них продуктивнее, чем на классических компьютерах.

Опережение по времени выполнения некоторых приемов с помощью квантовых компьютеров по сравнению с классическими объясняется квантовым параллелизмом. В то время как на вход обыкновенной машины подается одна входная переменная, в квантовом компьютере можно задать целую суперпозицию из всех входных данных. Следовательно, и выходом будут одна переменная и выходная суперпозиция соответственно.

Еще одним из актуальных и перспективных направлений применений уравнения Штурма – Лиувилля является его использование в оптоэлектронике для расчета и изучения планарных волноводных структур [12]. Рассмотрим данное приложение исследуемого уравнения более подробно.

В указанной работе автор проводит вывод уравнения Гельмгольца для компонент электрических и магнитных полей из уравнения Максвелла в плоском (планарном) волноводе. Изучению планарных волноводов посвящено много популярных книг (см., например, [18, 20]).

Плоский волновод – это некая слоистая среда, состоящая из таких составных частей, как: верхнее полупространство с показателем преломления n_1 , пленка, куда падает свет, с показателем преломления n_2 , и нижний слой (подложка) с показателем преломления n_3 . Из-за своей несложной структуры плоский волновод считается одним из самых простых диэлектрических волноводов [12]. Далее для простоты мы будем считать, что $n_1 = n_3$. На рисунке 1.1 представлена схема такого плоского волновода.

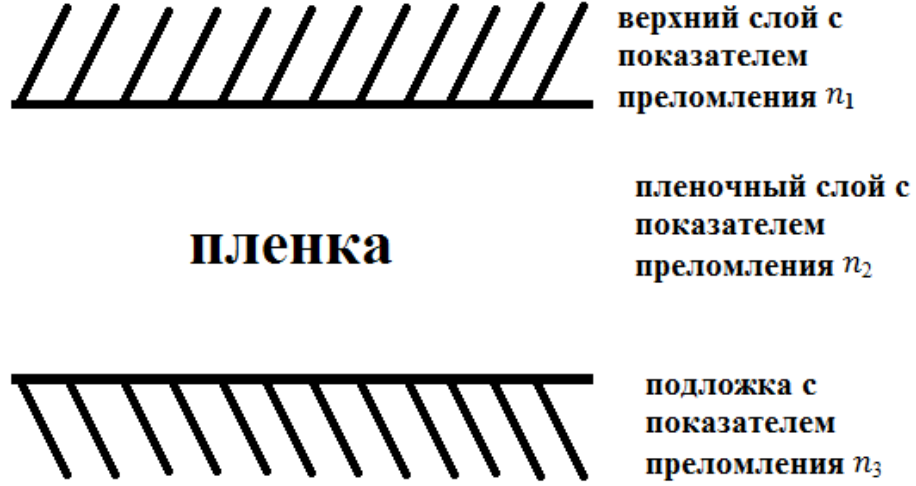


Рисунок 1.1 – Плоский волновод

Таким образом, для планарного волновода показатель преломления n зависит только от одной переменной: $n = n(x)$.

Пусть дано волновое уравнение

$$\Delta \tilde{U} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial t^2} = 0, \quad (4)$$

где Δ – оператор Лапласа: $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$;

$\tilde{U}$ – это некоторая функция, зависящая от переменных x, y, z и t : $\tilde{U} = \tilde{U}(x, y, z, t)$. Данная функция может иметь смысл, например, как одна из компонент электрического либо магнитного поля;

c – это скорость света в вакууме (универсальная физическая постоянная);

n – показатель преломления среды, представляет собой функцию, в общем случае зависящую от трех переменных $n = n(x, y, z)$.

Будем рассматривать частное решение уравнения (4) в виде

$$\tilde{U} = \tilde{U}(\vec{r}, t) = U(\vec{r})T(t) = U(\vec{r})e^{i\omega t}, \quad (5)$$

где $\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z$;

$T(t) = e^{i\omega t}$.

Подставим решение (5) в исходное уравнение (4) и получим следующее:

$$\Delta e^{i\omega t} U(\vec{r}) - \frac{n^2}{c^2} (i^2 \omega^2 U(\vec{r}) e^{i\omega t}) = 0.$$

Учитывая, что $i^2 = -1$ получим, что

$$\Delta e^{i\omega t} U(\vec{r}) - \frac{n^2}{c^2} (-\omega^2 U(\vec{r}) e^{i\omega t}) = 0.$$

Далее введем обозначение $\kappa_0^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$, тогда

$$\Delta e^{i\omega t} U(\vec{r}) + \kappa_0^2 n^2 e^{i\omega t} U(\vec{r}) = 0.$$

Сократив на множитель $e^{i\omega t}$ (который не обращается в нуль), получим уравнение Гельмгольца:

$$\Delta U(\vec{r}) + \kappa_0^2 n^2 U(\vec{r}) = 0. \quad (6)$$

Напомним, мы решаем уравнение в планарном волноводе, следовательно, n – функция от одной переменной: $n = n(x)$.

Для решения уравнения (6) используем метод разделения переменных [2] для функции U : $U(\vec{r}) = U(x, y, z) = F(y, z)X(x)$.

Для простоты будем обозначать $F(y, z)$ буквой F , а функцию $X(x)$ – соответственно X .

$$\begin{aligned} F \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + X \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \kappa_0^2 n^2 F X &= 0 \\ F \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \right) &= -\kappa_0^2 n^2 F X \end{aligned}$$

Далее, разделим обе части уравнения на FX

$$\begin{aligned} \frac{\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}}{X} + \frac{\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}}{F} &= -\kappa_0^2 n^2 \\ \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \kappa_0^2 n^2 X &= - \frac{\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}}{F} X \end{aligned}$$

Данное уравнение имеет решение, если обе его части равны одному и тому же числу. Пусть этим числом будет s^2 , тогда

$$\frac{\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}}{X} + \kappa_0^2 n^2 = s^2 \quad \text{и} \quad - \frac{\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}}{F} = s^2.$$

Решая правое уравнение получим, что $\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} = -s^2 F$.

Решая уравнение из левой части получим, что

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \kappa_0^2 n^2 X = s^2 X \Rightarrow \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X(\kappa_0^2 n^2 - s^2) = 0.$$

Если сделать переобозначение переменных: X на y , $\kappa_0^2 n^2$ на $-P(x)$, s^2 на $-\lambda$, то получим уравнение (2).

1.2 Решение уравнения Штурма – Лиувилля в общем виде для простейших кусочно-постоянных функций

Поскольку в дальнейшем нам предстоит иметь дело со спектральной задачей (2), в которой функция $P(x)$ является кусочно-постоянной, мы рассмотрим здесь подробно решение соответствующей задачи для функции $P(x)$ следующего вида:

$$P(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -R \\ -V, & -R < x < R \\ 0, & x \geq R \end{cases}$$

Имея ввиду упомянутые выше приложения рассматриваемой задачи к квантовой механике, мы будем называть такую функцию симметричной потенциальной ямой, употребляя это словосочетание без кавычек.

Для более наглядного представления начертим график исходной функции (Рис. 1.2).

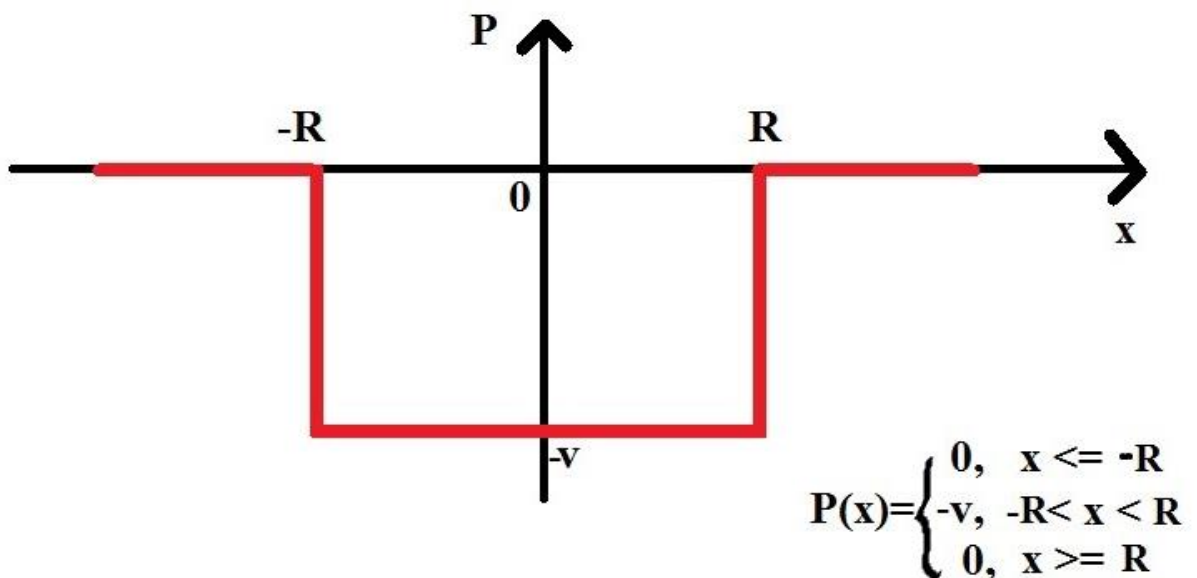


Рисунок 1.2 – Симметричная потенциальная яма

Для поиска решения уравнения (2) в направлении от $-\infty$ к $+\infty$ в случае с потенциальной ямой используется следующий алгоритм:

1. Поиск решения уравнения на промежутке $(-\infty, -R]$.

Взяв во внимание тот факт, что $\lambda = -k^2$ и учитывая, что $P(x) = 0$ на $(-\infty, -R]$, исходное уравнение (2) принимает вид:

$$y'' = k^2 y. \quad (7)$$

Общее решение данного уравнения имеет вид: $y_1(x) = C_1 e^{-kx} + C_2 e^{kx}$, где C_1, C_2 – константы. Учитывая, что нас интересуют только частные решения уравнения Штурма – Лиувилля, принадлежащие пространству $L_2(R)$, мы считаем, что $C_1 = 0$. Не ограничивая общности, полагаем также $C_2 = 1$. Тогда, интересующее нас решение уравнения Штурма – Лиувилля на полуинтервале $(-\infty, -R]$ имеет вид:

$$y_1(x) = e^{kx}. \quad (8)$$

2. Поиск решения уравнения на промежутке $(-R, R)$.

Учитывая, что $P(x) = -V$ на $(-R, R)$, исходное уравнение (2) принимает вид:

$$y'' + (V + \lambda)y = 0. \quad (9)$$

Общим решением уравнения (9) будет функция

$$y_2(x) = C_3 \sin(\sqrt{v - k^2}x) + C_4 \cos(\sqrt{v - k^2}x), \quad k > 0. \quad (10)$$

3. Следующим шагом является сшивка решений (8) и (10) в точке $x = -R$.

$$\text{Условие сшивки: } \begin{cases} y_1(-R_{-0}) = y_2(-R_{+0}) \\ y'_1(-R_{-0}) = y'_2(-R_{+0}) \end{cases}$$

Считая величину k заданной, получаем систему двух уравнений с двумя неизвестными C_3 и C_4 :

$$\begin{cases} e^{-kR} = C_3 \sin(\sqrt{V - k^2}(-R)) + C_4 \cos(\sqrt{V - k^2}(-R)) \\ -ke^{-kR} = C_3 \cos(\sqrt{V - k^2}(-R))(-\sqrt{V - k^2}) - C_4 \sin(\sqrt{V - k^2}(-R))(-\sqrt{V - k^2}) \end{cases}$$

Решая ее, находим

$$C_3 = \frac{ke^{-kR} \cos(\sqrt{v - k^2}R)}{\sqrt{v - k^2}} - e^{-kR} \sin(\sqrt{v - k^2}R)$$

$$C_4 = \frac{ke^{-kR} \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{\sqrt{v-k^2}} + e^{-kR} \cos(\sqrt{v-k^2}R)$$

Таким образом, коэффициенты для общего решения (10) найдены. Можно переходить к следующему шагу.

4. Поиск решения уравнения на промежутке $[R, +\infty)$.

Аналогично п.1 возьмем во внимание факт что $\lambda = -k^2$ и будем учитывать, что $P(x) = 0$ на $[R, +\infty)$. Тогда исходное уравнение (2) принимает вид: $y'' = k^2 y$. Решая его на $[R, +\infty)$, получим решение

$$y_3(x) = C_5 e^{-kx} + C_6 e^{kx}, \quad (11)$$

где C_5, C_6 – константы, зависящие от спектрального параметра k .

5. Так же, как и в точке $x = -R$, константы C_5 и C_6 находятся из условия «сшивки» – условия непрерывной дифференцируемости итогового решения в точке $x = R$. Сшивая решения $y_2(x)$ и $y_3(x)$, получим выражения для коэффициентов C_5, C_6

$$C_5 = \frac{k \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{\sqrt{v-k^2}} + \frac{\sqrt{v-k^2} \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{k} \quad (12)$$

$$C_6 = \frac{k \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}\sqrt{v-k^2}} - \frac{\sqrt{v-k^2} \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}k} +$$

$$+ \frac{\cos^2(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}} - \frac{\sin^2(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}} \quad (13)$$

Для того, чтобы решение $y_3(x)$ принадлежало пространству $L_2(R)$ необходимо потребовать $C_6 = 0$.

$$\frac{k \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}\sqrt{v-k^2}} - \frac{\sqrt{v-k^2} \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}k} + \frac{\cos^2(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}} - \frac{\sin^2(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}} = 0$$

Можно упростить данное выражение, объединив слагаемые и перенеся часть в правую сторону

$$\frac{(k^2 - (v - k^2)) \cos(\sqrt{v-k^2}R) \sin(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}k\sqrt{v-k^2}} = \frac{\sin^2(\sqrt{v-k^2}R) - \cos^2(\sqrt{v-k^2}R)}{e^{2kR}}$$

Умножив левую и правую части на e^{2kR} получим, что

$$\frac{(2k^2 - V) \cos(\sqrt{V - k^2}R) \sin(\sqrt{V - k^2}R)}{k\sqrt{V - k^2}} = \sin^2(\sqrt{V - k^2}R) - \cos^2(\sqrt{V - k^2}R)$$

Далее разделим обе части на $\cos^2(\sqrt{V - k^2}R) \neq 0$. Тогда,

$$\frac{(2k^2 - V)}{k\sqrt{V - k^2}} \tan(\sqrt{V - k^2}R) = \tan^2(\sqrt{V - k^2}R) - 1 \quad (14)$$

Спектром рассматриваемой задачи будут те значения k , которые являются корнями данного (трансцендентного) уравнения.

1.3 Поиск дискретного спектра с учетом четности и нечетности

Процедуру вычисления спектра можно существенно упростить, если мы используем тот факт, что функция $P(x)$ в нашем случае является четной. Учитывая, что точки спектра в нашем случае не вырождены, отсюда легко доказать, что собственные функции задачи (2) будут либо четными, либо нечетными.

Алгоритм вычисления спектра с учетом четности либо нечетности решения:

1. Т.к. ищутся четные/нечетные решения, то график потенциала можно рассматривать не на всем промежутке $(-\infty, +\infty)$, а лишь на его половине, т.е. $(-\infty, 0]$ или $[0, +\infty)$. Мы рассмотрим расчет спектра на промежутке $[0, +\infty)$, двигаясь в направлении от 0 к $+\infty$.
2. Поиск решения для $x \in [0, R]$.

На текущем отрезке уравнение Штурма – Лиувилля (2) принимает вид $y'' + (V - k^2)y = 0$. Линейно – независимые решения данного уравнения, одно из которых четное, а другое нечетное, легко записываются:

$$y_{\text{четн}} = \cos(\sqrt{v - k^2}x) \text{ при } C_1 = 0, C_2 = 1 \quad (15)$$

$$y_{\text{нечетн}} = \sin(\sqrt{v - k^2}x) \text{ при } C_1 = 1, C_2 = 0. \quad (16)$$

3. Поиск решения для $x \in (R, +\infty)$.

Учитывая, что $P(x) = 0$ на данном интервале, и взяв во внимание формулу (2) запишем соответствующее уравнение Штурма – Лиувилля:

$y'' - k^2 y = 0$. Как отмечалось выше, общим решением этого уравнения на указанном интервале является функция

$$y_2(x) = C_3 e^{-kx} + C_4 e^{kx}. \quad (17)$$

4. Далее мы, как и ранее, выполняем «сшивку» либо четного (15), либо нечетного (16) решений с функцией $y_2(x)$ в точке $x = R$. Напомним, «сшивку» означает, что мы требуем, чтобы на границе R решение было непрерывно – дифференцируемым. Выполняя «сшивку» функций (15) и (17) получим следующую систему уравнений для констант C_3 и C_4 :

$$\begin{cases} \cos(\sqrt{V - k^2} R) = C_3 e^{-kR} + C_4 e^{kR} \\ -\sin(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2}) = C_3 e^{-kR}(-k) + C_4 e^{kR} k \end{cases} \quad (18)$$

Для нечетного решения аналогично:

$$\begin{cases} \sin(\sqrt{V - k^2} R) = C_3 e^{-kR} + C_4 e^{kR} \\ \cos(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2}) = C_3 e^{-kR}(-k) + C_4 e^{kR} k \end{cases} \quad (19)$$

Решая системы (18) и (19) получим уравнения коэффициентов C_3, C_4 .

Для четного решения:

$$\begin{aligned} C_3 &= \frac{\cos(\sqrt{V - k^2} R)}{2e^{-kR}} + \frac{\sin(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2})}{2ke^{-kR}} \\ C_4 &= \frac{\cos(\sqrt{V - k^2} R)}{2e^{kR}} - \frac{\sin(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2})}{2ke^{kR}} \end{aligned} \quad (20)$$

Для нечетного решения:

$$\begin{aligned} C_3 &= \frac{\sin(\sqrt{V - k^2} R)}{2e^{-kR}} - \frac{\cos(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2})}{2ke^{-kR}} \\ C_4 &= \frac{\sin(\sqrt{V - k^2} R)}{2e^{kR}} + \frac{\cos(\sqrt{V - k^2} R)(\sqrt{V - k^2})}{2ke^{kR}} \end{aligned} \quad (21)$$

5. Не стоит забывать, что решения уравнения Штурма – Лиувилля ищутся в пространстве $L_2(R)$, следовательно, чтобы решение (17) удовлетворяло этому требованию необходимо потребовать обращения в ноль коэффициента C_4 (при растущем слагаемом), как для четного случая, так и для нечетного решения, т.е.

для четного решения:

$$\frac{\cos(\sqrt{V-k^2}R)}{2e^{kR}} - \frac{\sin(\sqrt{V-k^2}R)(\sqrt{V-k^2})}{2ke^{kR}} = 0 \Rightarrow \tan(\sqrt{V-k^2}R) = \frac{k}{\sqrt{V-k^2}} \quad (22)$$

для нечетного решения:

$$\frac{\sin(\sqrt{V-k^2}R)}{2e^{kR}} + \frac{\cos(\sqrt{V-k^2}R)(\sqrt{V-k^2})}{2ke^{kR}} = 0 \Rightarrow \tan(\sqrt{V-k^2}R) = -\frac{\sqrt{V-k^2}}{k} \quad (23)$$

Для упрощения записи произведем замену переменных. Пусть $\xi = \sqrt{V-k^2}$. Тогда уравнения (22), (23) запишутся в следующем виде

для четного решения:

$$\tan(\xi R) = \frac{\sqrt{V-\xi^2}}{\xi} \quad (24)$$

для нечетного решения:

$$\tan(\xi R) = -\frac{\xi}{\sqrt{V-\xi^2}} \quad (25)$$

Спектром будут являться те значения k , которые соответствуют корням данного уравнения.

Трансцендентные уравнения явно не решаются, однако легко поддаются качественному исследованию. Для этого необходимо построить на одном графике левые и правые части данных уравнений (Рис. 1.3), (Рис. 1.4). В итоге можно сделать следующие выводы:

1. Решения данных уравнений существуют.
2. Их число конечно.
3. Число решений пропорционально глубине «потенциальной ямы»; этот факт устанавливается посредством серии численных экспериментов.

Пусть, например, радиус ширины ямы $R = 1$, глубина ямы $V = 4$. Подставим эти значения в (24), (25), тогда

для четного решения:

$$\tan(\xi) = \frac{\sqrt{4-\xi^2}}{\xi} \quad (26)$$

для нечетного решения:

$$\tan(\xi) = -\frac{\xi}{\sqrt{4-\xi^2}} \quad (27)$$

Графики решения соответствующих трансцендентных уравнений с заданными величинами представлены ниже (Рис. 1.3), (Рис. 1.4).

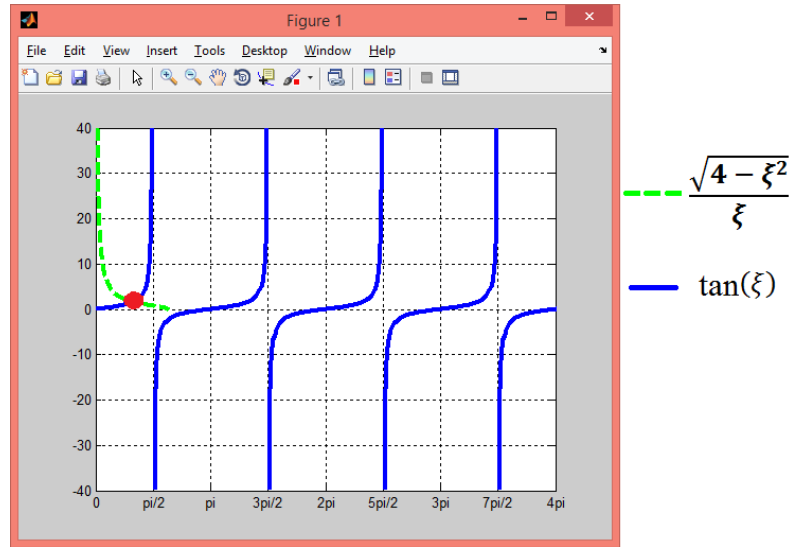


Рисунок 1.3 – Спектр четного решения

На выше указанном изображении представлено графическое решение трансцендентного уравнения (26). Точка спектра – это точка пересечения графиков $\tan(\xi)$ и $\frac{\sqrt{4-\xi^2}}{\xi}$ (на рисунке она выделена красным кружком). Далее продемонстрировано графическое решение для нечетного случая (Рис. 1.4).

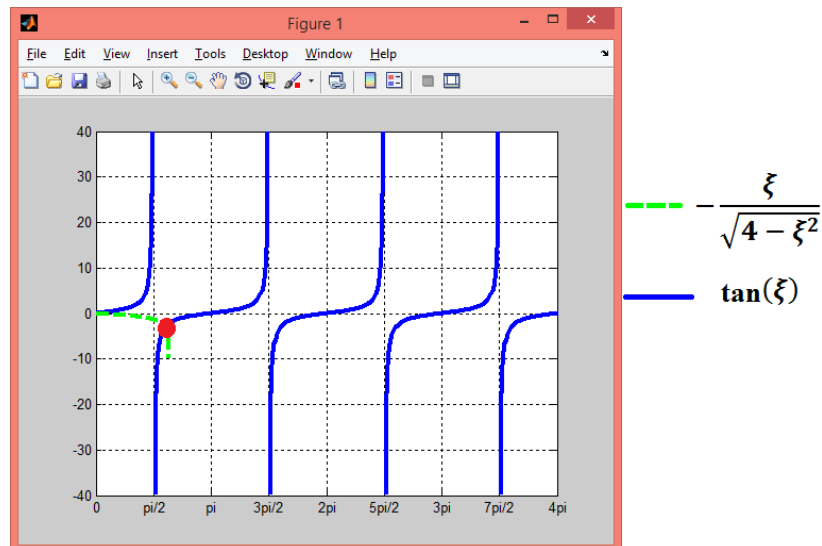


Рисунок 1.4 – Спектр нечетного решения

Совокупность точек пересечения для случая четного и нечетного решения и есть спектр. Далее увеличим глубину ямы при той же ее ширине, т.е. R остается прежним: $R = 1$; глубина ямы $V = 25$. Построим графики при новых значениях величин (Рис.1.5), (Рис. 1.6).

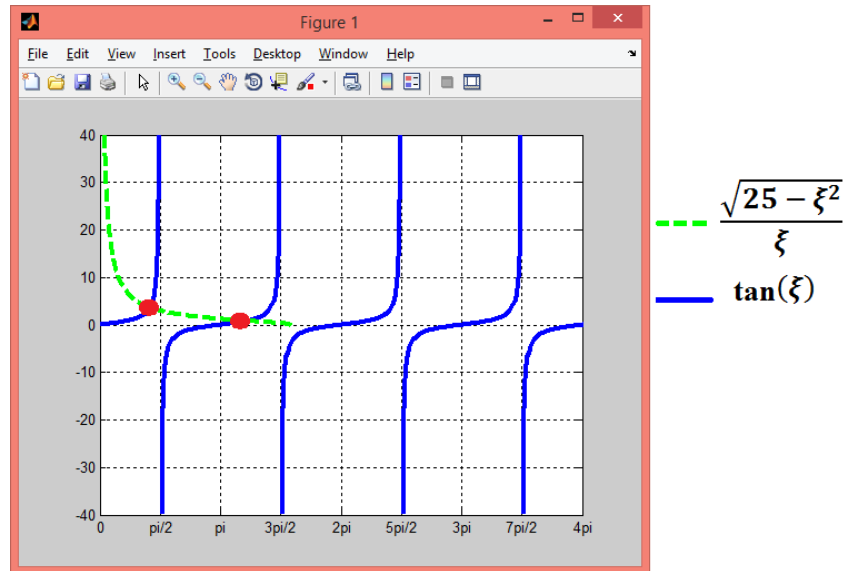


Рисунок 1.5 – Спектр четного решения для новых значений

Аналогично предыдущим действиям, на выше указанном изображении представлено графическое решение трансцендентного уравнения (24) при $R = 1, V = 25$. Точка спектра – это точка пересечения графиков $\tan(\xi)$ и $\frac{\sqrt{25-\xi^2}}{\xi}$.

Ниже приведен график для нечетного решения (Рис. 1.6).

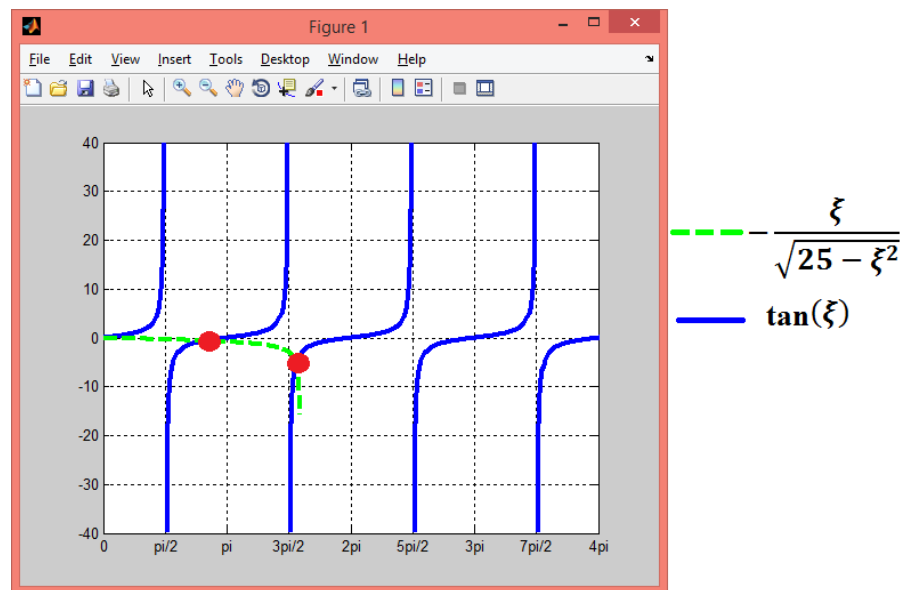


Рисунок 1.6 – Спектр нечетного решения для новых значений

Таким образом, в ходе исследования зависимости спектра от глубины ямы исходя из графического представления данных был установлен факт, что чем глубже яма, тем больше точек пересечения, следовательно, тем больше количество точек дискретного спектра.

Глава 2 Алгоритм вычисления дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля

В этой главе рассматривается метод “стрельбы” для численного расчета дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля с ограниченным потенциалом, имеющим компактный носитель. Далее проводится блок – схема программного продукта и описание его реализации.

2.1 Описание метода “стрельбы”

Метод “стрельбы” – это один из самых распространенных методов для численного решения дифференциальных уравнений. Метод “стрельбы” в общем смысле заключается в поиске точек спектра, задавая спектральный параметр λ наугад в уравнении (2). Задавая параметр λ произвольным образом, мы проводим численное исследование непрерывно – дифференцируемого решения уравнения Штурма – Лиувилля на предмет его принадлежности к пространству $L_2(R)$. Далее приведем пошаговый алгоритм:

1. Выбираем произвольное k в уравнении (2).
2. Для произвольной ямы (Рис. 2.1) уравнение Штурма – Лиувилля явно не решается, поэтому необходимо проделать кусочно-постоянную аппроксимацию исходной функции $P(x)$ (Рис. 2.2).

Кусочно-постоянная функция определяется следующим образом: пусть $P(x)$ исходная функция, такая, что $P(x) \equiv 0$ при $x \notin [-R, R]$. Пусть N – количество отрезков, на которые разбивается интервал $[-R, R]$, а x_i – точки разбиения ($x_0 = -R$; $x_N = R$). Пусть $\chi_{[x_{i-1}, x_i]}(x)$ – характеристическая функция отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ ($i = 1, \dots, N$) такая, что

$$\chi_{[x_{i-1}, x_i]}(x) = \begin{cases} 1, & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ 0, & x \notin [x_{i-1}, x_i] \end{cases}$$

Тогда $\tilde{P}(x) = \sum_{i=1}^N P(\xi_i) \chi_{[x_{i-1}, x_i]}(x)$, где $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i]$.

3. Уравнение решается явно на каждом интервале, где функция $P(x)$ постоянна.

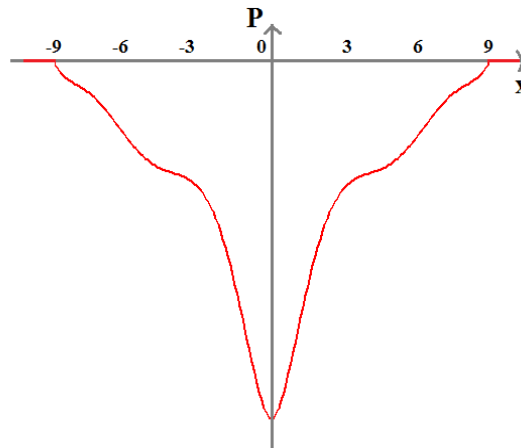


Рисунок 2.1 – Исходная функция

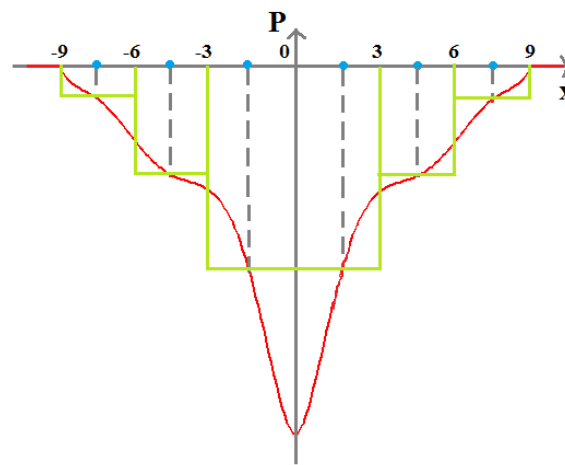


Рисунок 2.2 – Кусочно-аппроксимированная функция

4. Следующий шаг – это решение уравнения явно на каждом “куске” 0 или ступенька:

4.1 $x < -R$ уравнение решается явно: $y(x) = e^{kx}, k > 0$.

4.2 При $-R \leq x \leq R$ «сшивка» всех решений вида $A \sin(\sqrt{v - k^2}R) + B \cos(\sqrt{v - k^2}R)$ последовательно. Следует помнить, что «сшивка» – требование того, чтобы на каждой границе решение было непрерывно – дифференцируемым.

4.3 Определяем решение при $x > R$: $y(x) = C_1 e^{-kx} + C_2 e^{kx}$.

5. Для того, чтобы общее решение удовлетворяло пространству $L_2(R)$ необходимо потребовать $C_2(k) = 0$.

6. Проверка: если $C_2(k) = 0$, то $\lambda = -k^2$ – точка спектра. Если нет, то возвращаемся к п.1.

Таким образом перебираются различные k , по которым в итоге можно построить функцию $C_2 = C_2(k)$ (Рис. 2.3).

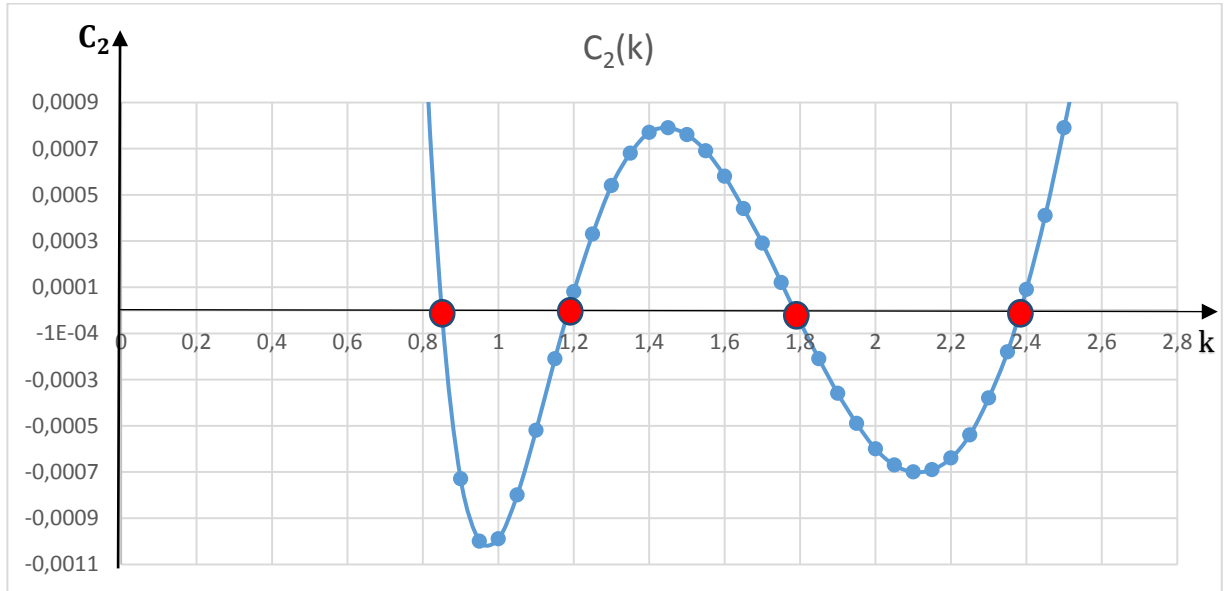


Рисунок 2.3 – Функция $C_2(k)$

Построение функции очень удобно для наглядного представления точек спектра (на графике они обозначены кружочками красного цвета).

Точность приближения в методе стрельбы высчитывается по следующим формулам:

$$\Delta_2 := \|P(x) - \tilde{P}(x)\|_{L_2} = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |P(x) - \tilde{P}(x)|^2 dx}$$

$$\Delta_\infty := \|P(x) - \tilde{P}(x)\|_{L_\infty} = \sup_{x \in R} |P(x) - \tilde{P}(x)|, \quad (28)$$

где $P(x)$ – исходная произвольная функция,

$\tilde{P}(x)$ – кусочно-постоянная функция,

Δ_2, Δ_∞ – величины, представляющие собой отклонения заданной кусочно-гладкой функции $P(x)$ от приближенной функции $\tilde{P}(x)$ по норме соответствующего пространства.

Далее представим блок – схему данного метода (Рис. 2.4).

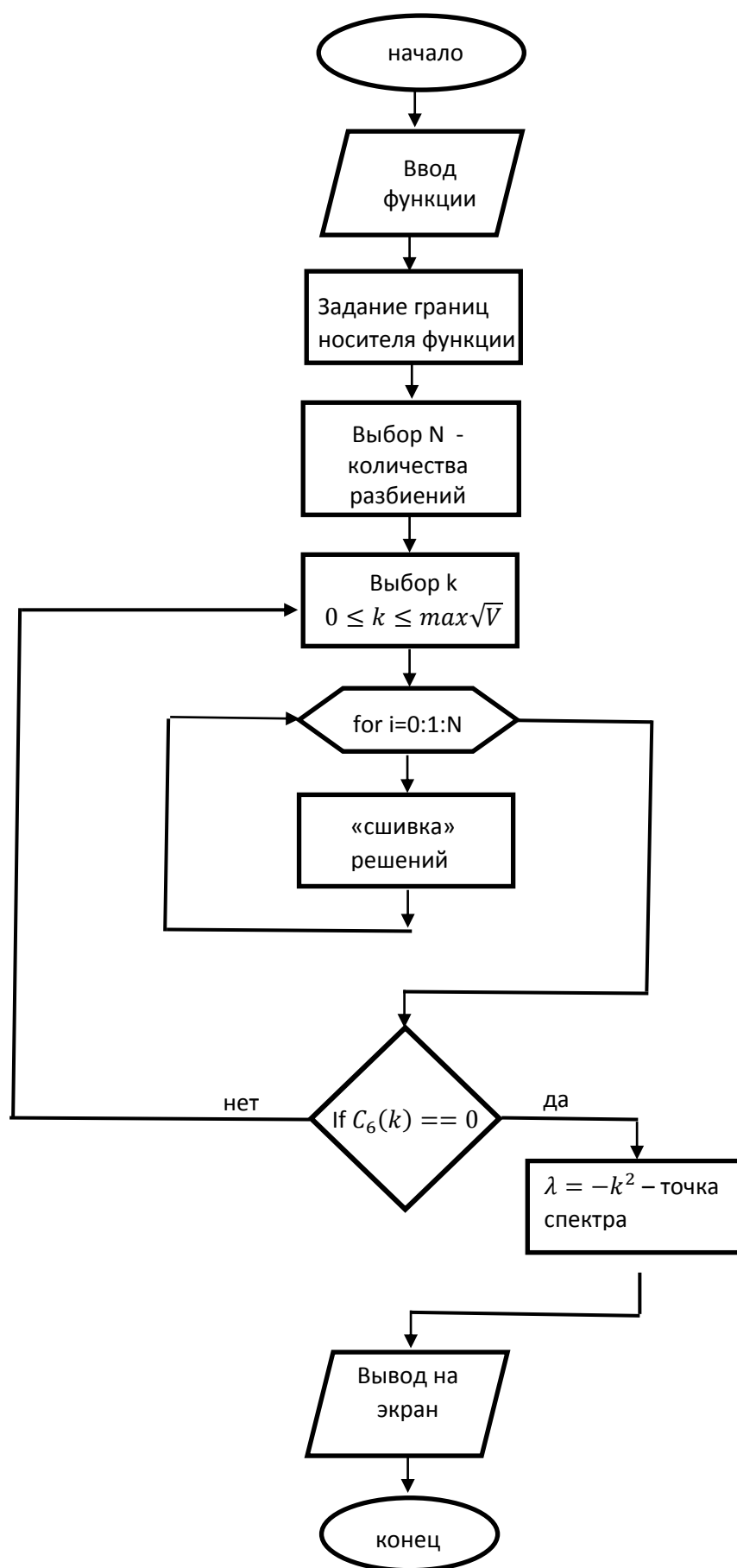


Рисунок 2.4 – Блок – схема метода “стрельбы”

2.2 Улучшение эффективности метода стрельбы

Увеличение количества точек разбиения при аппроксимации улучшает точность приближения к исходной функции. Однако это приводит к значительному возрастанию времени работы программы, поскольку при этом приходится делать больше машинных операций. Так был разработан алгоритм улучшения эффективности метода “стрельбы”, позволяющий увеличить точность вычислений, не увеличивая количество точек разбиений. Таким образом, аппроксимация будет производиться не с постоянным шагом, а с шагом, который зависит от производной исходной функции в точке. Точность приближения в улучшенном алгоритме высчитывается по формулам (28).

Задача усовершенствованного метода – обеспечить как можно более точное приближение аппроксимированной функции к исходной, не увеличивая количество разбиений. В данном случае шаг аппроксимации зависит от производной функции в точке следующим образом: чем больше производная, тем меньше шаг.

В основе алгоритма используется формула Тейлора для разложения монотонной функции в степенной ряд:

$$P(x + h) - P(x) = \frac{dP}{dx}(x) \cdot h + \frac{1}{2!} \frac{d^2P}{dx^2}(x) \cdot h^2 + \dots \quad (29)$$

Следует отметить, что если исходная функция не является монотонной, то необходимо произвести ее разбиение на монотонные функции, выполняя приведенный ниже алгоритм на каждом участке монотонности отдельно.

Алгоритм усовершенствованного метода представлен ниже:

Пусть дана произвольная монотонная функция $P(x)$. Например, парабола $x^2 - 9$ на $[0; R]$, представленная на (Рис. 2.5).

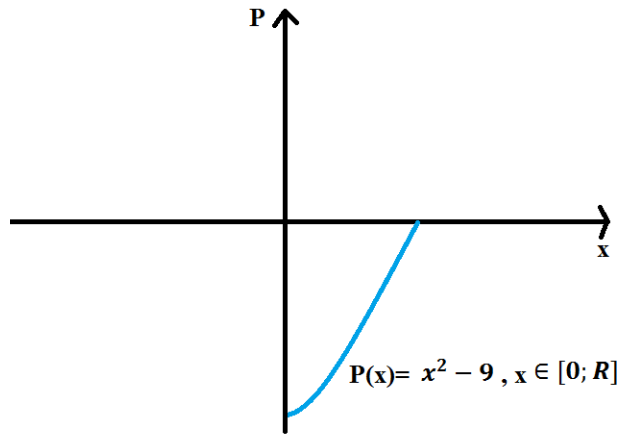


Рисунок 2.5 – Парабола

- 1) Определяем максимальное изменение функции в пределах интервала монотонности ΔP :

$$\Delta P = \frac{|P_{min} - P_{max}|}{N}, \quad (30)$$

где N – число разбиений,

P_{min} – минимальное значение монотонной функции,

P_{max} – максимальное значение монотонной функции.

- 2) Из (29) определяем

$$\tilde{h}_i = \begin{cases} \Delta P / \left. \frac{dP}{dx} \right|_{x=x_{i-1}} & \left(\frac{dP}{dx} \neq 0 \right) \\ \sqrt{2! \Delta P / \left. \frac{d^2 P}{dx^2} \right|_{x=x_{i-1}}} & \left(\frac{dP}{dx} = 0; \frac{d^2 P}{dx^2} \neq 0 \right) \\ \dots & \end{cases} \quad (31)$$

$$3) h_i = \mu \cdot \tilde{h}_i \quad (32)$$

- 4) Определяем поправочный коэффициент μ из условия $\sum_{i=1}^N h_i = R$

$$\mu = R / (\sum_{i=1}^N \tilde{h}_i) \quad (33)$$

- 5) Таким образом, мы получили шаги разбиения h_i для кусочной аппроксимации. Далее, согласно предыдущему алгоритму метода стрельбы, осуществляем «сшивку» всех решений.

Далее приведем блок – схему к усовершенствованному методу (Рис. 2.6).

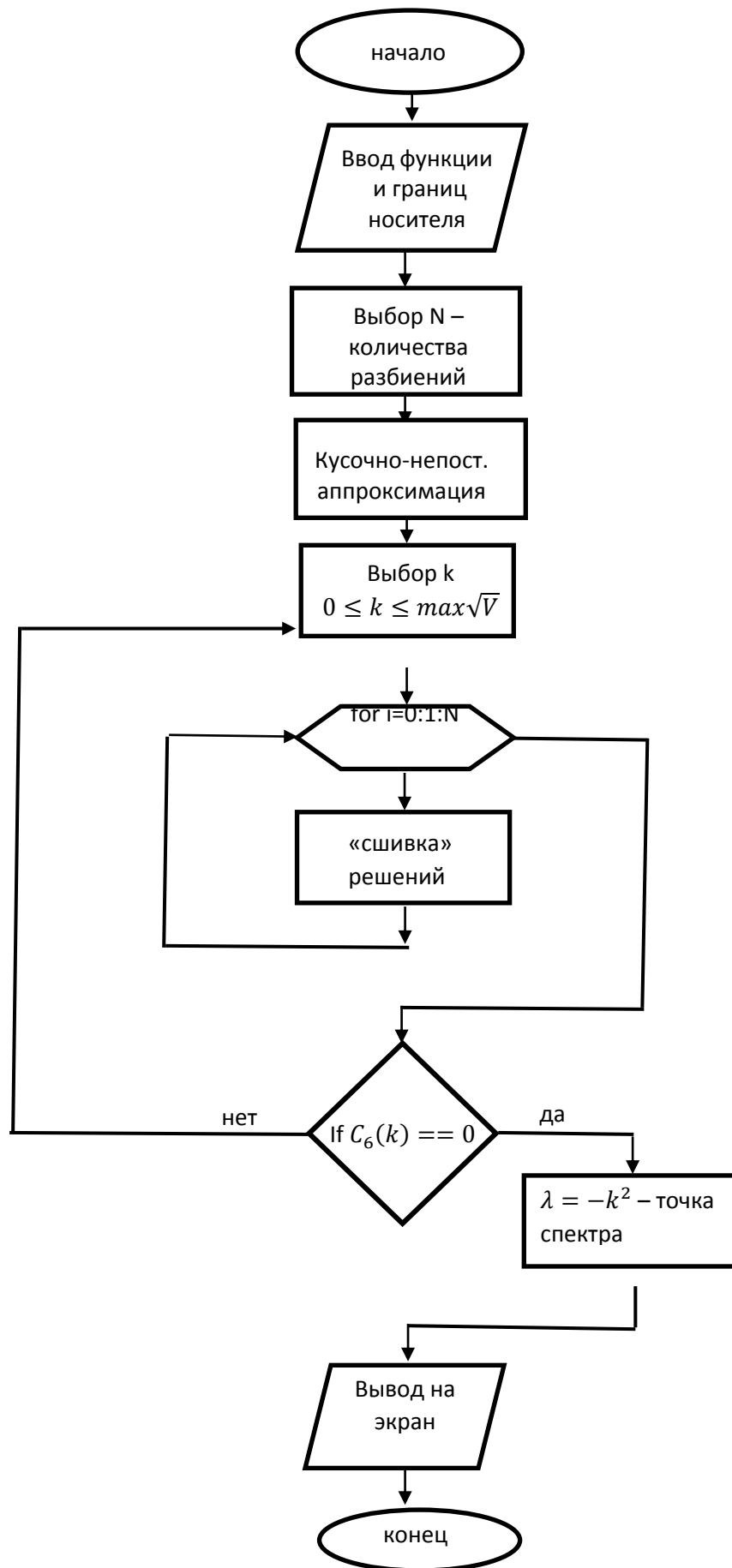


Рисунок 2.6 – Блок – схема усовершенствованного метода “стрельбы”

2.3 Реализация в среде MatLab

Весь код программного продукта реализован в среде MatLab. Выбор среды программирования основывался на сравнительном анализе между такими программами как MatLab, GAUSS, Maple, S-Plus, Mathematica [19]. MatLab – это распространенный язык программирования, который подходит для выполнения различных математических задач (см., например, [9, 13]). Так как многие функции уже встроены в программу, происходит экономия времени разработчика и уменьшение размерности кода. Высокие показатели математических функциональных возможностей среды Matlab продемонстрированы ниже (Рис. 2.7).

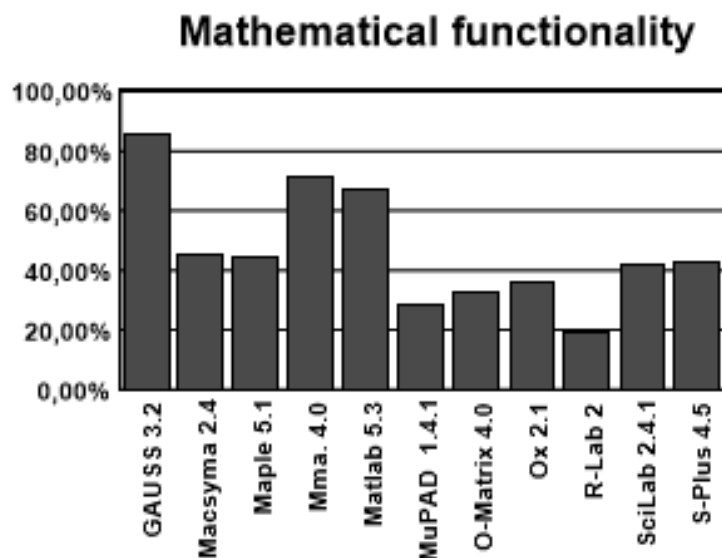


Рисунок 2.7 – Математическая функциональность

Одним из главных достоинств программной среды Matlab является высокий показатель графических возможностей (Рис. 2.8).

В программе возможна реализация построения изображений как в формате 3D, так и в 2D. Свойства изображений можно задать пользователем. Так, например, можно изменить цвет графика, толщину линии, контур. Также предусмотрена возможность вращения фигур, что очень удобно при работе с 3D изображениями.

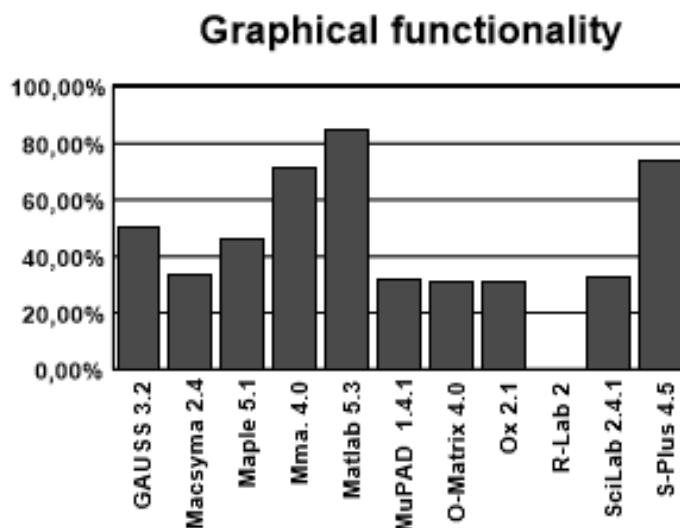


Рисунок 2.8 – Графика

Далее рассмотрим итоговое сравнение сред по всем возможным характеристикам (Рис. 2.9).

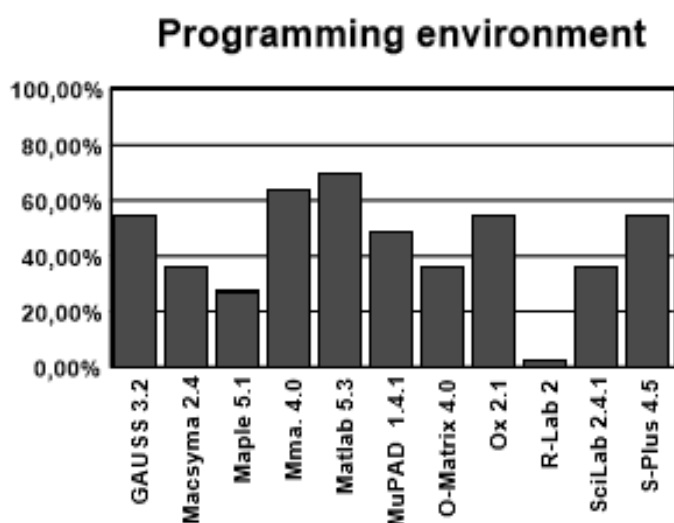


Рисунок 2.9 – Сравнение сред программирования

Из выше упомянутого рисунка видно, что Matlab занимает ведущую позицию, по сравнению с остальными программами, в плане общего сравнения. Все эти факты и обусловили выбор среды программирования именно в пользу Matlab.

Рассмотрим основные функции и конструкции, применяемые в данной работе.

Программирование в среде Matlab начинается с очищения рабочего окна для удобной и правильной работы пользователя. Для этого используется команда `clc`. Далее происходит объявление переменных: переменные могут являться символьными, а могут и числовыми (Рис. 2.10).

Ниже приведен код для задания таких параметров, как отрезок $[a; b]$ – отрезок, на котором исходная функция $P(x)$, называемая “потенциалом”, не обращается в ноль. Далее происходит объявление переменной x , как переменной символьного типа.

```
a=-3; % начало отрезка
b=3;  %конец отрезка
syms x;
```

Рисунок 2.10 – Фрагмент кода с объявлением переменных

Для обозначения переменной как символьный тип необходимо перед именем написать `syms`.

Массивы в среде MatLab указываются в квадратных скобках и могут быть как заполненными, так и пустыми. Конструкция с использованием массивов приведена ниже (Рис. 2.11).

```
newX_mas=[]; // объявление пустого массива
newY_mas=[];
xxx=[ a:h:b ]; % т для сшивки
```

Рисунок 2.11 – Объявление массивов

В программе MatLab для выполнения таких операций, как вычисление квадратного корня и поиск максимального элемента в массиве предусмотрены готовые функции `sqrt` и `max`. Применение этих функций на практике для вычисления норм пространств L_2, L_∞ продемонстрированы на (Рис. 2.12).

```
L2=sqrt(sum(integral2));
L=max(maxznach);
```

Рисунок 2.12 – Фрагмент кода с использованием встроенных функций

Для того, чтобы в символьную переменную занести в последующем числовое значение используется команда subs (Рис. 2.13).

```
syms C1;syms C2;syms C3;syms C4;syms C5;
for k= 0.1:0.05:sqrt(max(v))-0.0000001

for i=1
y(i)=C1*(exp(-k*x))+C2*(exp(k*x));
y(i)=subs(y(i),C1,0);|
y(i)=subs(y(i),C2,1);
end
```

Рисунок 2.13 – Использование команды subs

В данной бакалаврской работе эта функция применяется в случае, когда после “сшивки” численно нашлись коэффициенты в решении уравнения (2) например такие, как C_1, C_2, C_3, C_4 .

Для выполнения повторных операций, а именно последовательная “сшивки” решений уравнений, используется цикл for (Рис. 2.14).

```
for i = 2:n-1
if( 0<k<sqrt(v(i-1)))
A=sin(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);B=cos(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);
else
A=exp(-sqrt(k^2-v(i-1))*x);B=exp(sqrt(k^2-v(i-1))*x);
```

Рисунок 2.14 – Фрагмент кода с применением цикла for

В реализации метода стрельбы при осуществлении сшивки необходимо взятие производной. Для этого используется команда diff (Рис. 2.15).

```
prA=diff(A,x);
prB=diff(B,x);
```

Рисунок 2.15 – Взятие производной

Сама “сшивки” решений уравнения осуществляется с помощью следующей конструкции (Рис. 2.16)

```
f = [y(i-1); ypr(i-1)];
MATR= [AminusR BminusR
prAminusR prBminusR];
D = MATR\f;|
```

Рисунок 2.16 – Сшивки

Иногда для осуществления вычислений было необходимо округление данных в целях более удобного визуального представления чисел (Рис. 2.17).

```
D=double(D);
C5=D(1);
C6=D(2);
C6=roundn(C6,-5)
```

Рисунок 2.17 – Округление чисел

В улучшенном методе стрельбы для вычисления изменения функции ΔP используются команды нахождения минимума функции и максимума функции (Рис. 2.18).

```
for pi=1:kol+1    % т.min и т.max монотонных функций
xmin(pi)=fminbnd('(x.^2)-9',kkk(pi),kkk(pi+1));
xmax(pi)=fminbnd('-((x.^2)-9)',kkk(pi),kkk(pi+1));
end
```

Рисунок 2.18 – Поиск минимума и максимума функции

В работе используются формулы, где необходимо возведение в степень. Например, при вводе функции параболы $x^2 - 9$. Для этого используется значок $\wedge$ (Рис. 2.19).

```
syms x;
y=(x.^2)-9; % исходная функция
```

Рисунок 2.19 – Возведение в степень

В итоге вывод на экран осуществляется с помощью функции `sprintf` (Рис. 2.20)

```
k0=sprintf('%.3f',k)
```

Рисунок 2.20 – Вывод на экран

2.4 Замечания

При проведении численного эксперимента по вычислению спектра оператора Штурма – Лиувилля для различных потенциалов мы столкнулись с такими трудностями как: в усовершенствованном методе стрельбы при расчете непостоянного шага на основе формулы Тейлора программа выдавала ошибку.

Это произошло в случае с потенциалом, заданным полуокружностью. Например, $P(x) = -\sqrt{4 - x^2}$ на $[-2; 2]$ (Рис. 2.21).

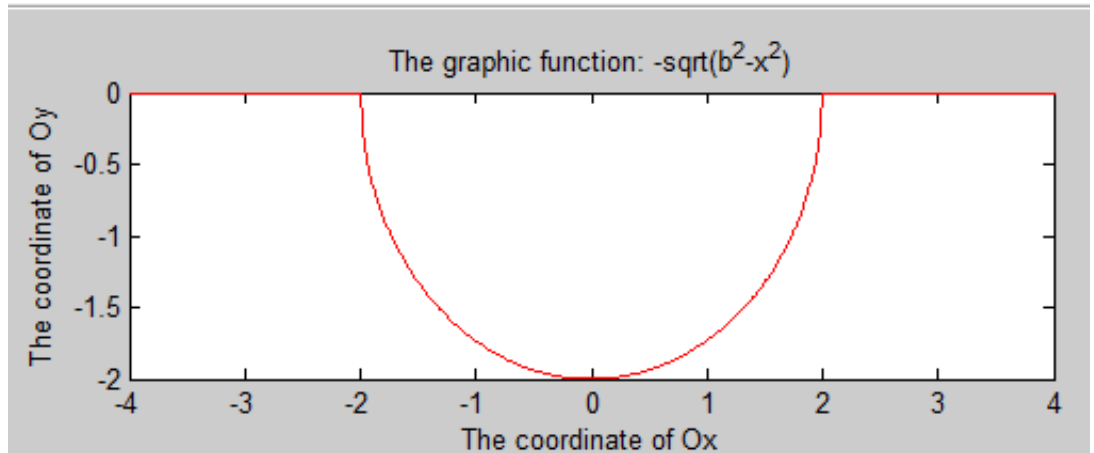


Рисунок 2.21 – Полуокружность

При взятии производной в точке $x = -2$ происходило деление на 0.

$$P'(x) = \frac{x}{\sqrt{4 - x^2}}$$

Во избежание ошибок в работе программы, была взята точка, ближайшая к -2. Так была взята точка $x = -1.999999$. Благодаря замене выбранной точке, спектр найден, уровни энергии построены (Рис. 2.22).

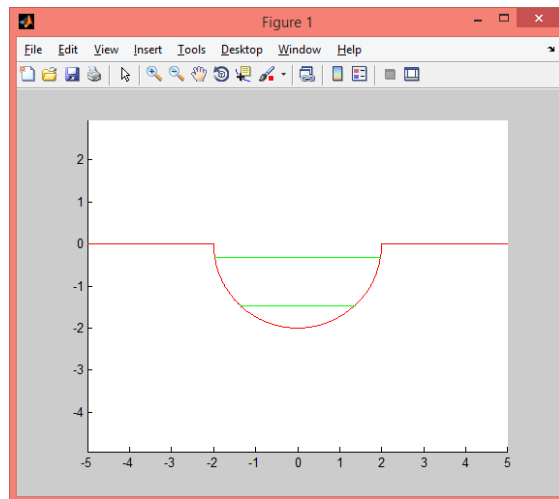


Рисунок 2.22 – Уровни энергии для полуокружности

Со следующей сложностью мы столкнулись при работе с функциями с модулем. Например, мы взяли одну из самых распространенных и несложных функций $P(x) = |x| - 2$ на $[-2; 2]$ (Рис. 2.23).

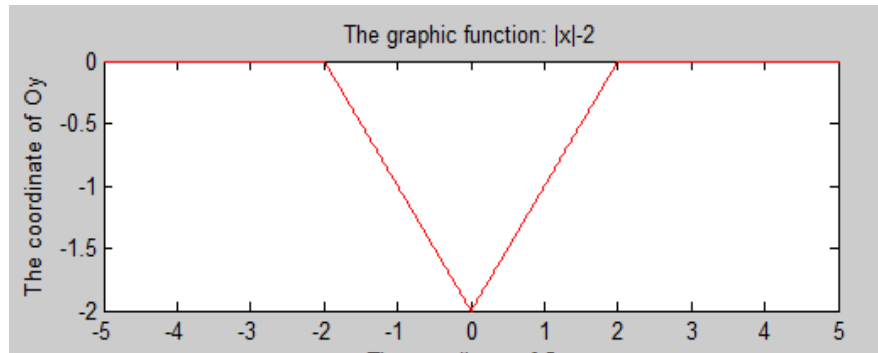


Рисунок 2.23 – Модуль

В программной среде Matlab взятие производной от модуля осуществляется следующим образом:

$$|x|' = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x = 0 \\ -x, & x < 0 \end{cases}$$

Таким образом, в точке $x = 0$ производная первого и последующих порядков равны 0, следовательно $\tilde{h}_1 = 0$ – разбиений не происходит. Выходом из этой ситуации послужило разбиение графика $|x| - 2$ на две прямые:

- 1) $x - 2, \quad 0 \leq x \leq 2;$
- 2) $-x - 2, \quad -2 \leq x < 0.$

Следовательно, мы избавились от модуля. Производные первого порядка соответствующих функций в точке $x = 0$ равны 1 и -1 соответственно. Разбиение осуществлено, спектр найден. Далее можно построить уровни энергии для заданной функции (Рис. 2.24).

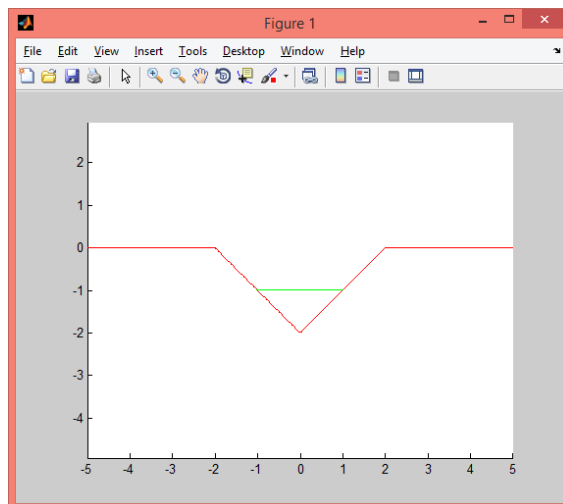


Рисунок 2.24 – Уровни энергии для функции с модулем

Можно сделать вывод о том, что несмотря на столкнувшиеся трудности, второй метод действителен и работает. Указанные трудности свидетельствуют о том, что встроенные функции MatLab в окрестности особых точек исследуемой функции необходимо применять с осторожностью.

2.5 Проведение численного эксперимента

Разработанный алгоритм отработывался на коэффициентных функциях различного вида. Кроме полуокружности и функции с модулем, описанные выше, мы рассматривали такие функции, как параболу (Рис. 2.25):

$$P(x) = \frac{2}{3}x^2 - 6, x \in [-3; 3],$$

полином третьей степени:

$$P(x) = (|x| - 2)^3 + 2|x| - 7, x \in [-3; 3],$$

кусочно-заданную функцию:

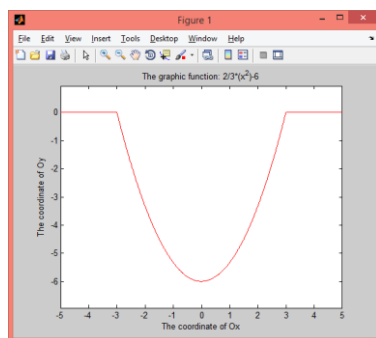
$$P(x) = \begin{cases} x^2 - 9, & |x| \in [0; 1) \\ (x - 1)^2 - 8, & |x| \in [1; 3) \\ (x - 3)^2 - 4, & |x| \in [3; 5] \end{cases}$$

полином пятой степени:

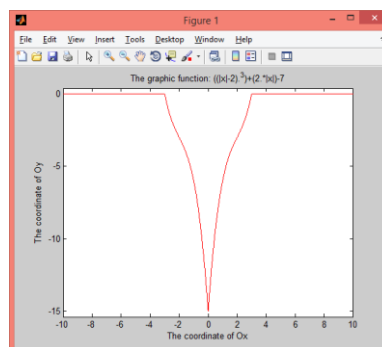
$$P(x) = \frac{|x|(|x|-1)(|x|-4)(|x|-6)(|x|-9)}{112} - \frac{|x|(|x|-1)(|x|-4)(|x|-8)(|x|-9)}{60} + \\ \frac{|x|(|x|-1)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{240} - \frac{3|x|(|x|-4)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{280} + \\ \frac{(|x|-1)(|x|-4)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{144}, x \in [-9; 9]$$

полином шестой степени:

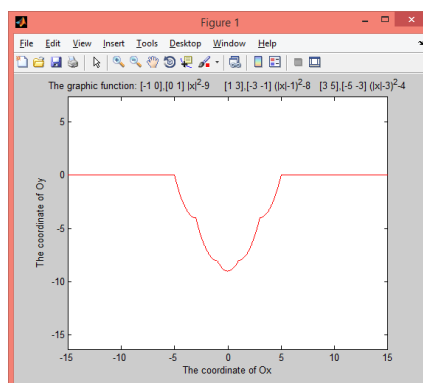
$$P(x) = \frac{|x|(|x|-2)(|x|-3)(|x|-5)(|x|-6)(|x|-9)}{1440} - \frac{|x|(|x|-2)(|x|-3)(|x|-5)(|x|-8)(|x|-9)}{144} + \\ \frac{|x|(|x|-2)(|x|-3)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{90} - \frac{|x|(|x|-2)(|x|-5)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{108} + \\ \frac{|x|(|x|-3)(|x|-5)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{144} - \frac{7(|x|-2)(|x|-3)(|x|-5)(|x|-6)(|x|-8)(|x|-9)}{6480}, x \in [-9; 9]$$



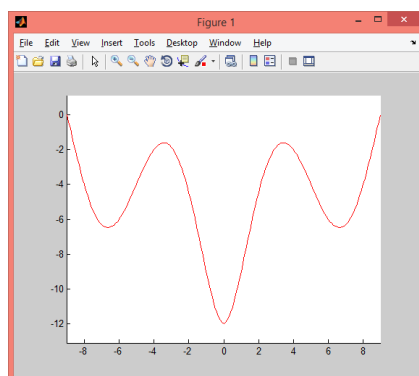
а)



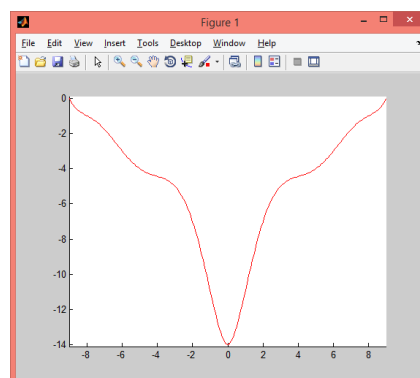
б)



в)



г)

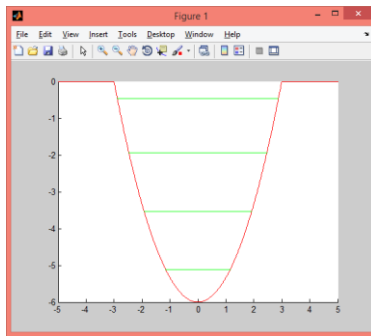


д)

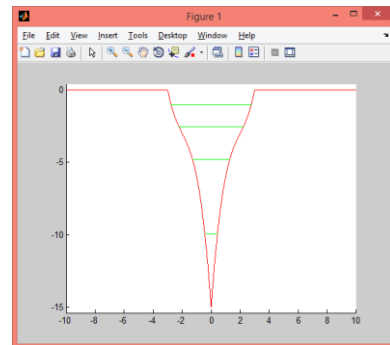
Рисунок 2.25 – Графики коэффициентных функций: а) парабола; б) полином 3 степени; в) кусочно-заданная функция; г) полином 5 степени; д) полином 6 степени

В ходе исследования проводилось вычисление дискретного спектра двумя способами: при прохождении всей ямы в направлении слева на право; при рассмотрении функции через четное/нечетное решение. Все численные расчеты содержатся в приложении. В процессе работы проводился поиск точек дискретного спектра для заданного потенциала и сравнивались метод “стрельбы” с кусочно-постоянной аппроксимацией и усовершенствованный

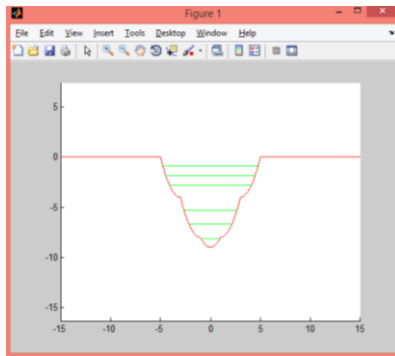
метод “стрельбы” с кусочно-непостоянной аппроксимацией. Согласно результатам вычислений, для каждой функции в итоге были построены уровни энергии (Рис. 2.26).



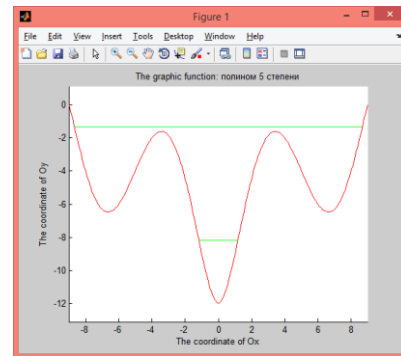
а)



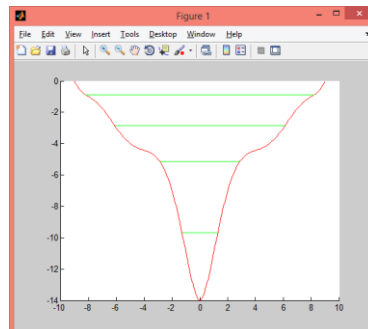
б)



в)



г)



д)

Рисунок 2.26 – Уровни энергии коэффициентных функций: а) парабола; б) полином 3 степени; в) кусочно-заданная функция; г) полином 5 степени; д) полином 6 степени

Результатом исследования стал вывод о том, что метод “стрельбы” с кусочно-постоянной аппроксимацией менее точный по сравнению с усовершенствованным методом, где шаг не постоянный.

Заключение

Была проведена работа, в ходе которой был разработан и реализован в среде MatLab алгоритм для расчета дискретного спектра оператора Штурма – Лиувилля с коэффициентами, имеющими компактный носитель. Теоретической основой для разработанного и реализованного алгоритма являлся метод “стрельбы”. Далее алгоритм был усовершенствован так, что новый алгоритм повышал точность аппроксимации исходной функции при неизменном (того же порядка) количестве операций. Итоговым решением стало то, что использование метода с улучшенной эффективностью для поиска спектра является более точным, чем метод “стрельбы” с постоянным шагом разбиения. Приведем таблицу, подтверждающую выводы (Таблица 1).

Таблица 1 – Итоги

$h=const$	$h \neq const$
Количество разбиений $N=10$	
$\Delta_2 = 7,5837$	$\Delta_2 = 7,1008$
$\Delta_\infty = 6,3445$	$\Delta_\infty = 5,8392$
Количество разбиений $N=50$	
$\Delta_2 = 0,8792$	$\Delta_2 = 0,7591$
$\Delta_\infty = 0,7911$	$\Delta_\infty = 0,5373$
Количество разбиений $N=100$	
$\Delta_2 = 0,44$	$\Delta_2 = 0,3109$
$\Delta_\infty = 0,3971$	$\Delta_\infty = 0,2174$

В таблице приведены точности вычисления спектра с постоянным шагом разбиения $h = const$ и с шагом, зависящем от производной функции, для количества разбиений N , равного 10, 50 и 100.

Список используемой литературы

1. Волков, Е. А. Численные методы: учебник / Е. А. Волков. – 5-е изд., стер. – СПб.: Лань, 2008. – 256 с.
2. Зайцев, В. Ф. Метод разделения переменных в математической физике: учебное пособие / В. Ф. Зайцев, А. Д. Полянин. – СПб.: РГПУ им. А. И. Герцена, 2009. – 92 с.
3. Карпикова, А.В. Асимптотика собственных значений оператора штурмалиувилля с периодическими краевыми условиями / А.В. Карпикова // Уфимский математический журнал. Том 6. № 3 (2014). С. 28-34.
4. Колмогоров, А. Н. Элементы теории функций и функционального анализа – 7-е изд. / А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин. – М.: Физматлит, 2009. – 571 с.
5. Лыков, С. Н. Квантовая механика: учебное пособие / С. Н. Лыков; под ред. Ипатовой. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 236 с.
6. Люстерник, Л. А. Краткий курс функционального анализа: учебное пособие / Л. А. Люстерник, В. И. Соболев. – СПб.: Лань, 2009. – 272 с.
7. Мирошниченко, Г. П. Численные методы: учебное пособие / Г. П. Мирошниченко, А. Г. Петрашень. – СПб.: НИУ ИТМО (Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики), 2007. – 120 с.
8. Наймарк, М. А. Линейные дифференциальные операторы – 3-е изд. / М. А. Наймарк. — М.: Физматлит, 2010. — 526 с.
9. Поршнев, С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB/ С.В. Поршнев. – СПб.: Лань, 2011. – 727 с.
- 10.Риффель, Э. Основы квантовых вычислений // Квантовый компьютер и квантовые вычисления, т. 1, № 1 / Э. Рифель, В. Полак. – Москва, 2000. – 4-57 с.
- 11.Срочко, В. А. Численные методы. Курс лекций: учебное пособие / В. А. Срочко. – СПб.: Лань, 2010. – 208 с.

12. Тамир, Т. Волноводная оптоэлектроника: пер. с англ. / [Т. Тамир и др.]; Под ред. Т. Тамира. – М.: Мир, 1991. – 575 с., ил.
13. Тарасевич, Ю. Ю. Использование пакетов Maple, Mathcad и LATEX2 при решении математических задач и подготовке математических и естественно-научных текстов/ Ю.Ю. Тарасевич.– Либроком, 2009.–136 с.(5)
14. Треногин, В. А. Функциональный анализ: учебник / В. А. Треногин. – М.: Физматлит, 2007. – 488 с.
15. Хелемский, А. Я. Лекции по функциональному анализу: учебник / А. Я. Хелемский. – М.: МЦНМО (Московский центр непрерывного математического образования), 2014. – 560 с.
16. Gadyl'shin, R. R. Local Perturbations of the Schrödinger operator on the axis // Theoretical and Mathematical Physics, 132(1): 976–982 (2002).
17. Kravchenko, V. V.: On a general solution of the one-dimensional stationary Schrödinger equation, 2007 // arXiv:0708.2491 [math-ph].
18. Laba1 H.P., Tkachuk V.M.: Quantum mechanical analogy and supersymmetry of electromagnetic wave modes in planar waveguides, 2014 // arXiv:1403.1416 [quant-ph]
19. Steinhaus S. Comparison of mathematical programs for data analysis. – Germany: University of Frankfurt, 1999. – p. 48.
20. Yassin G., Grimes P.K., King O.G., North C.E.: Waveguide-to-planar circuit transition for millimetre-wave detectors, 2008 // arXiv:0806.0255 [astro-ph].

Приложение А

Графическое решение трансцендентного уравнения для четного случая

```

y_mas=[];x_mas=[];r=1;v=4; % объявление переменных и массивов
for k=1:8
ksi=-pi/2+pi*(k-1)+0.025:0.01*pi:pi/2+pi*(k-1);
y=tan(ksi*r);
y_mas(:,k)=y;
x_mas(:,k)=ksi;
end
plot(x_mas,y_mas,'Color','b','LineWidth',3) % построение графика  $\tan(\xi R)$ 

hold on;

ksi=0.01:0.01:sqrt(v);
y2=sqrt(v-ksi.*ksi)./ksi;

plot(ksi,y2,'Color','g','LineWidth',3, 'LineStyle', '--') % построение графика  $\frac{\sqrt{4-\xi^2}}{\xi}$ 

hold on
set(gca,'XTick',0:pi/2:9*pi/2)
set(gca, 'XTickLabel',{'0', 'pi/2', 'pi', '3pi/2', '2pi',...
    '5pi/2', '3pi', '7pi/2', '4pi', '9pi/2'}) % подпись оси x
grid on
axis([0 4*pi -40 40]) % установка диапазонов координат по осям x и y

```

Приложение Б

Графическое решение трансцендентного уравнения для нечетного случая

```

y_mas=[];x_mas=[];r=1;v=4; % объявление переменных и массивов
for k=1:8
ksi=-pi/2+pi*(k-1)+0.025:0.01*pi:pi/2+pi*(k-1);
y=tan(ksi*r);
y_mas(:,k)=y;
x_mas(:,k)=ksi;
end
plot(x_mas,y_mas,'Color','b','LineWidth',3) % построение графика  $\tan(\xi R)$ 
hold on; ksi=0.01:0.01:sqrt(v); y2=-ksi./sqrt(v-ksi.*ksi);
plot(ksi,y2,'Color','g','LineWidth',3, 'LineStyle', '--') % построение графика  $-\frac{\xi}{\sqrt{4-\xi^2}}$ 
hold on
set(gca,'XTick',0:pi/2:9*pi/2)
set(gca, 'XTickLabel',{'0', 'pi/2', 'pi', '3pi/2', '2pi',...
    '5pi/2', '3pi', '7pi/2', '4pi', '9pi/2'}) % подпись оси x
grid on
axis([0 4*pi -40 40]) % установка диапазонов координат по осям x и y

```

Приложение В

Поиск спектра с кусочно-постоянной аппроксимацией

```

a=-3; % начало отрезка (определение границ носителя)
b=3; %конец отрезка
syms x;
y=x.*x-9; % исходная функция
kol=100; %кол-во разбиений для правой части четной ямы
h=(b-a)/kol; % шаг для разбиения
newX_mas=[];
newY_mas=[];
xxx=[ a:h:b ]; % т для сшивки
newX= [ (xxx(1)+xxx(2))/2:h:b]; % новые координаты после разбиения
newY=subs(y,x,newX);
R=xxx; % точки для сшивки ям
v=abs(newY);
integral2=[]; znach1=[]; znach2=[];maxznach=[]; % вычисление точности
приближения
for i=1:length(v)
integral2(i)=int((abs(y-newY(i))).^2,R(i),R(i+1));
integral2(i)=double(integral2(i));
fun(i)=abs(y-newY(i));
znach1(i)=subs(fun(i),x,R(i)); znach1(i)=double(znach1(i));
znach2(i)=subs(fun(i),x,R(i+1));znach2(i)=double(znach2(i));
if(znach1(i)>znach2(i))
maxznach(i)=znach1(i);
else maxznach(i)=znach2(i);
end
end
L2=sqrt(sum(integral2)); %  $\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |P(x) - \tilde{P}(x)|^2 dx}$ 

```

```

L=max(maxznach); %  $\sup_{x \in R} |P(x) - \tilde{P}(x)|$ 
clear x; clear y;
syms C1;syms C2;syms C3;syms C4;syms C5; syms C6;syms
x;n=length(v)+2;m=length(R);i=1:n;
for k= 0.1:0.05:sqrt(max(v))-0.0000001 % задаем k

for i=1
y(i)=C1*(exp(-k*x))+C2*(exp(k*x)); % решение уравнения при  $x < a$ 
y(i)=subs(y(i),C1,0);
y(i)=subs(y(i),C2,1);
end

for i = 2:n-1
if( 0<k<sqrt(v(i-1)))
A=sin(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);B=cos(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);
else
A=exp(-sqrt(k^2-v(i-1))*x);B=exp(sqrt(k^2-v(i-1))*x); end
y(i)=C3*A+C4*B; % решение уравнения при  $a \leq x \leq b$ 
ypr(i-1)=diff(y(i-1),x);
prA=diff(A,x); % взятие производной
prB=diff(B,x);
ypr(i)=C3*prA+C4*prB;
y(i-1)=subs(y(i-1),x,R(i-1));
ypr(i-1)=subs(ypr(i-1),x,R(i-1));
AminusR=subs(A,x,R(i-1));BminusR=subs(B,x,R(i-1));
prAminusR=subs(prA,x,R(i-1));prBminusR=subs(prB,x,R(i-1));
f = [y(i-1); ypr(i-1)]; % сшивка
MATR= [AminusR BminusR
prAminusR prBminusR];

```

```

D = MATR\f;
C3=D(1);
C4=D(2);
y(i)=C3*A+C4*B;
ypr(i)=C3*prA+C4*prB;
end

for i=n
M=exp(-k*x);N=exp(k*x);
y(i)=C5*M+C6*N; % решение уравнения при  $x > b$ 
prM=diff(M,x);
prN=diff(N,x);
M=subs(M,x,R(m));N=subs(N,x,R(m));
prM=subs(prM,x,R(m));prN=subs(prN,x,R(m));
y(i-1)=subs(y(i-1),x,R(m));
ypr(i-1)=subs(ypr(i-1),x,R(m));
f = [y(i-1); ypr(i-1)]; % сшивка
MATR= [M N
      prM prN];
D =MATR\f;
D=double(D);
C5=D(1);
C6=D(2);
C6=roundn(C6,-5) % округление данных
k0=sprintf('%.3f',k) % вывод на экран
end
end

```

Приложение Г

Поиск спектра с кусочно-непостоянной аппроксимацией

```

a=-3; % начало отрезка
b=3; %конец отрезка
syms x;
y=(x.^2)-9; % исходная функция
pry=diff(y,x); % производная по x
kol=0; % кол-во производных=0
k=[]; % координаты по x, где производная=0
for X=a:0.01:b
    proizvodna=subs(pry,x,X);
    proizvodnanew=roundn(proizvodna,-2);
    if (proizvodnanew==0)
        kol=kol+1;
        k(kol)=X;
    end
end

kkk=[]; %%%%% точки, между которыми определены монотонные функции
if (kol~=0)
    kkk(1)=a;
    for z=2:kol+1
        kkk(z)=k(z-1);
    end
    kkk(kol+2)=b;
else
    kkk(1)=a;
    kkk(2)=b;
end

```

```

N=[]; % разбиение для каждой из монотонных функций
for j=1:kol+1 % для каждой монотонной функции
N(j)=input('введите разбиение');
end

for pi=1:kol+1 % т.min и т.max монотонных функций для поиска delU
xmin(pi)=fminbnd('(x.^2)-9',kkk(pi),kkk(pi+1));
xmax(pi)=fminbnd('-((x.^2)-9)',kkk(pi),kkk(pi+1));
end

x0=[]; % начальная координата каждой монотонной функции
x0(1,1)=a;
if (kol~=0)
for i=2:kol+1
x0(i,1)=k(i-1);
end
end

newX_mas=[]; % кси( произвольная точка на каждом шаге)
newY_mas=[]; % значение функции для каждого произвольного newX
newh_mas=[]; Sum=[]; M=[];
Ux0=[];Umax=[];Umin=[];delU=[];trh=[];H_mas=[];
for iii=1:kol+1
Umin(iii)=subs(y,x,xmin(iii)); Umin(iii)=roundn(Umin(iii),-2);
Umax(iii)=subs(y,x,xmax(iii)); Umax(iii)=roundn(Umax(iii),-2);
delU(iii)=abs(Umin(iii)-Umax(iii))/N(iii);
for i=1:N(iii);
for n=1:281474976710655 %%%%%%%%% порядок производной
z=diff(y,x,n); %%%%% производная порядка 1,2.....n=99999
z=subs(z,x,x0(iii,i));

```

```

if (z~=0)
newh(iii,i)=(abs(factorial(n).*delU(iii)/z)).^(1/n);
break;
end
end
x0(iii,i+1)=x0(iii,i)+newh(iii,i);
end
end

trh=newh';
Sum=sum(trh);
for i=1:kol+1
M(i)=(kkk(i+1)-kkk(i))./Sum(i); % поправочный коэффициент  $\mu$ 
end

for iii=1:kol+1
for ppp=1:N(iii)
H(iii,ppp)=M(iii).*newh(iii,ppp);
end
end
H=H'; H=H(:); H=H';
H=nonzeros(H);
H=H'; % шаги

R_mas=[];R(1)=a; % точки, в которых будет сшивка
for i=2:length(H)+1
R(i)=R(i-1)+H(i-1);
end

n=length(R);

```

```

for i=1:n-1
newX(i)=(R(i)+R(i+1))/2;
end
newY=subs(y,x,newX);
v=abs(newY);

integral2=[]; znach1=[]; znach2=[];maxznach=[]; % высчитывается точность
for i=1:length(v)
integral2(i)=int((abs(y-newY(i))).^2,R(i),R(i+1));
integral2(i)=double(integral2(i));
fun(i)=abs(y-newY(i));
znach1(i)=subs(fun(i),x,R(i));
znach2(i)=subs(fun(i),x,R(i+1));
if(znach1(i)>znach2(i))
maxznach(i)=znach1(i);
else maxznach(i)=znach2(i);
end
end

L2=sqrt(sum(integral2)); %  $\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |P(x) - \tilde{P}(x)|^2 dx}$ 

L=max(maxznach); %  $\sup_{x \in R} |P(x) - \tilde{P}(x)|$ 

clear x; clear y; clear i; clear n; clear m; clear N;clear k;clear M;
syms C1;syms C2;syms C3;syms C4;syms C5; syms C6;syms
x;n=length(v)+2;m=length(R);i=1:n;
for k= 0.1:0.05:sqrt(max(v))-0.0000001 % задаем k

for i=1
y(i)=C1*(exp(-k*x))+C2*(exp(k*x)); % решение уравнения при  $x < a$ 
y(i)=subs(y(i),C1,0);

```

```
y(i)=subs(y(i),C2,1);
```

```
end
```

```
for i = 2:n-1
```

```
if( 0<k<sqrt(v(i-1)))
```

```
A=sin(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);B=cos(sqrt(v(i-1)-k^2)*x);
```

```
else
```

```
A=exp(-sqrt(k^2-v(i-1))*x);B=exp(sqrt(k^2-v(i-1))*x); end
```

```
y(i)=C3*A+C4*B; % решение уравнения при  $a \leq x \leq b$ 
```

```
ypr(i-1)=diff(y(i-1),x); % взятие производной
```

```
prA=diff(A,x);
```

```
prB=diff(B,x);
```

```
ypr(i)=C3*prA+C4*prB;
```

```
y(i-1)=subs(y(i-1),x,R(i-1));
```

```
ypr(i-1)=subs(ypr(i-1),x,R(i-1));
```

```
AminusR=subs(A,x,R(i-1));BminusR=subs(B,x,R(i-1));
```

```
prAminusR=subs(prA,x,R(i-1));prBminusR=subs(prB,x,R(i-1));
```

```
f = [y(i-1); ypr(i-1)]; % сшивка
```

```
MATR= [AminusR BminusR
```

```
prAminusR prBminusR];
```

```
D = MATR\f;
```

```
C3=D(1);
```

```
C4=D(2);
```

```
y(i)=C3*A+C4*B;
```

```
ypr(i)=C3*prA+C4*prB;
```

```
end
```

```
for i=n
```

```
M=exp(-k*x);N=exp(k*x);
```

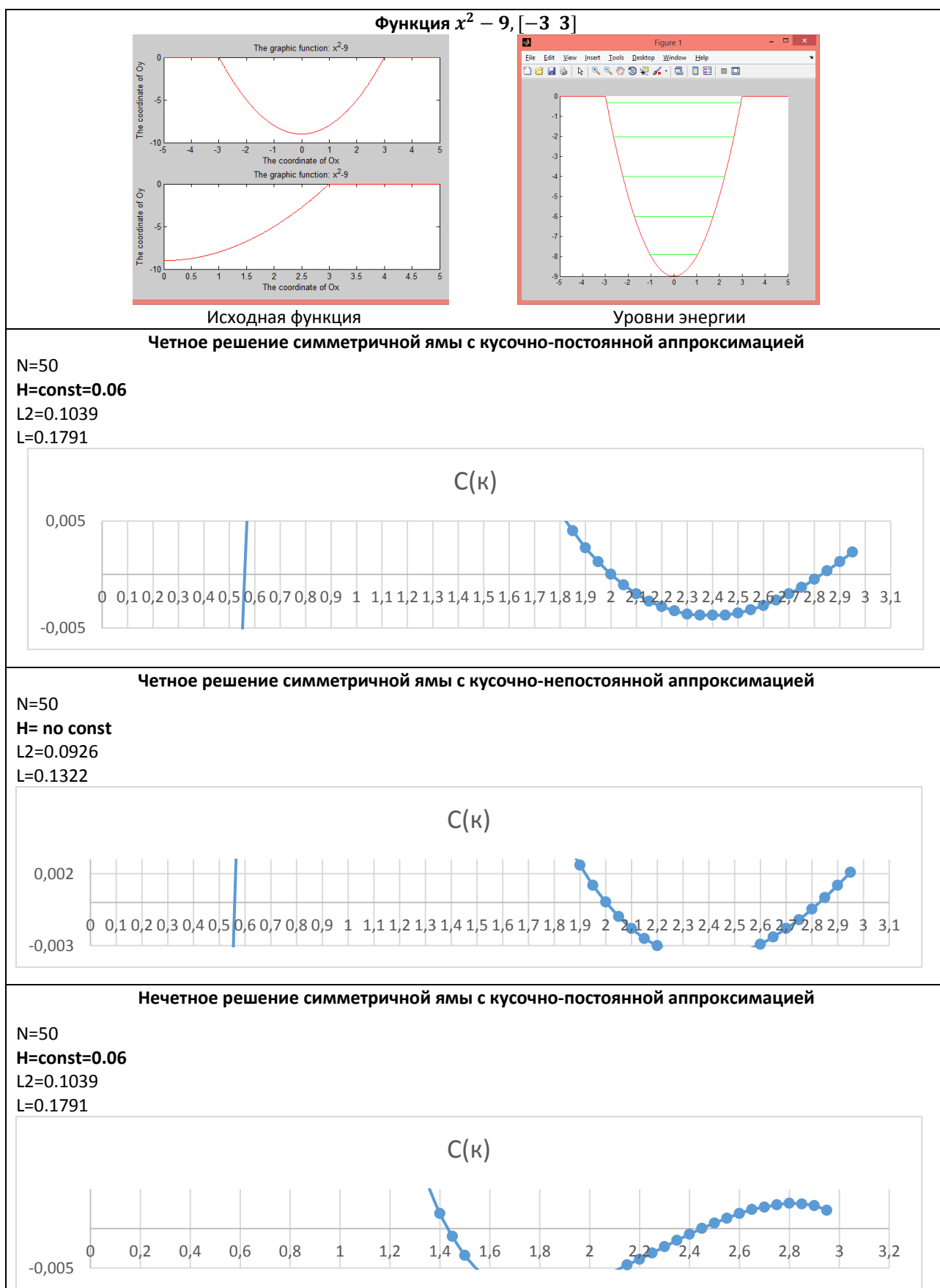
```
y(i)=C5*M+C6*N; % решение уравнения при  $x > b$ 
```

```

prM=diff(M,x);
prN=diff(N,x);
M=subs(M,x,R(m));N=subs(N,x,R(m));
prM=subs(prM,x,R(m));prN=subs(prN,x,R(m));
y(i-1)=subs(y(i-1),x,R(m));
ypr(i-1)=subs(ypr(i-1),x,R(m));
f = [y(i-1); ypr(i-1)]; % сшивка
MATR= [M N
        prM prN];
D =MATR\f;
D=double(D);
C5=D(1);
C6=D(2);
C6=roundn(C6,-5) % округление данных
k0=sprintf('%.3f',k) % вывод на экран
end
end

```

Вычисление дискретного спектра для различных функций



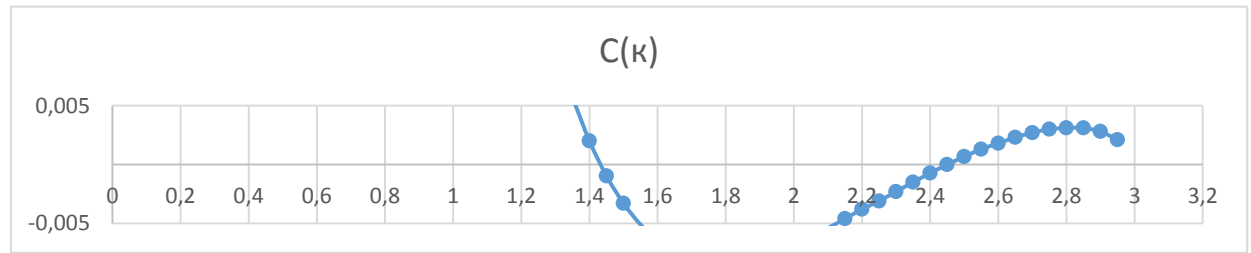
Нечетное решение симметричной ямы с кусочно-непостоянной аппроксимацией

N=50

H= no const

L2=0.0926

L=0.1322



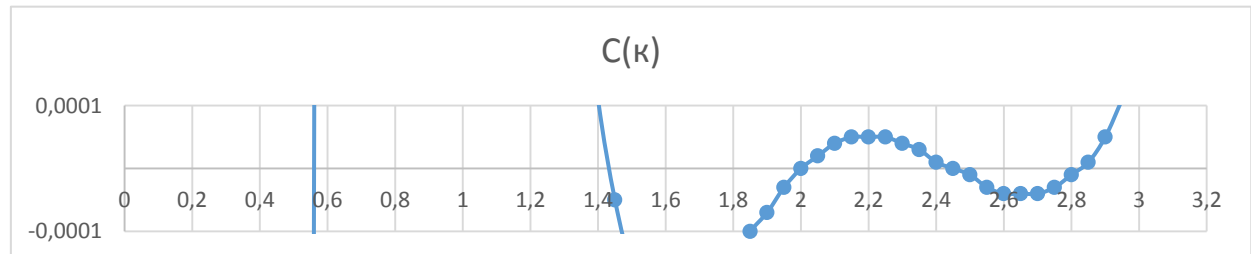
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с постоянным шагом разбиения

N=100

H=const=0.06

L2=0.147

L=0.1791



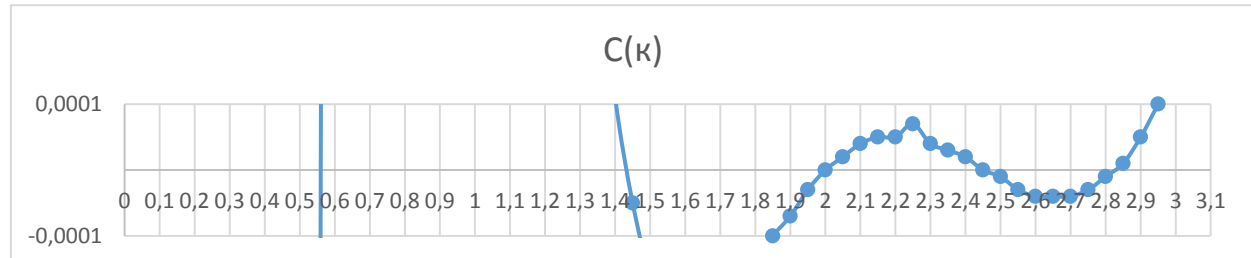
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с непостоянным шагом разбиения

N=100

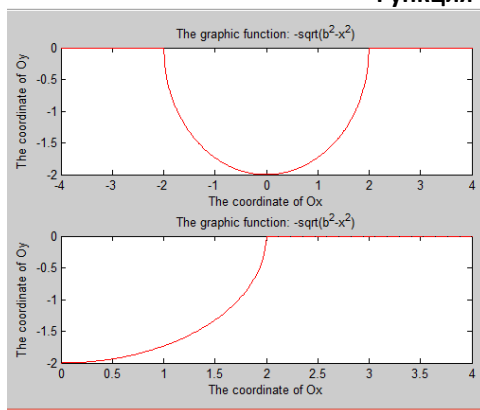
H= no const

L2=0.1254

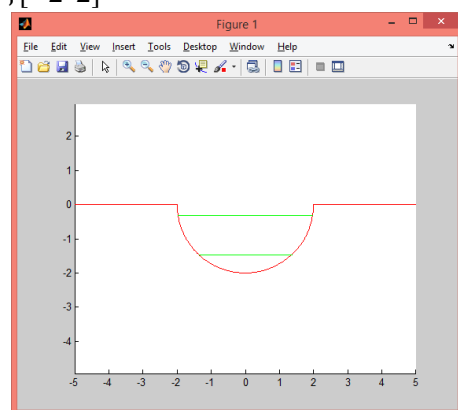
L=0.1322



Функция $-\sqrt{4-x^2}$, $[-2, 2]$



Исходная функция



Уровни энергии

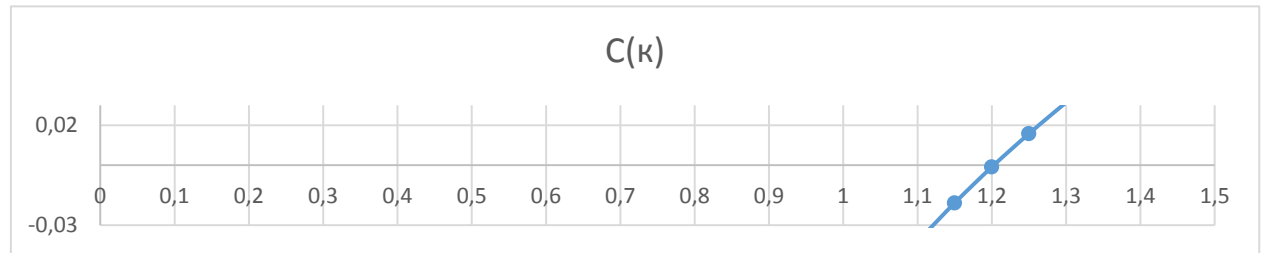
Четное решение симметричной ямы с кусочно-постоянной аппроксимацией

$N=50$

$H=\text{const}=0.04$

$L_2=0.0267$

$L=0.2821$



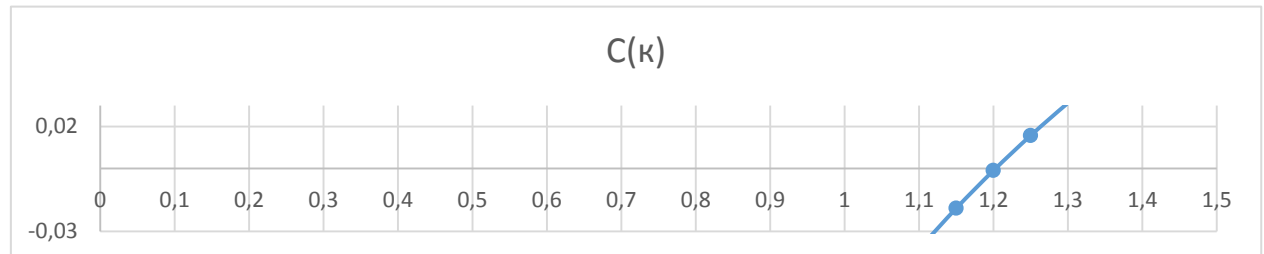
Четное решение симметричной ямы с кусочно-непостоянной аппроксимацией

$N=50$

$H= \text{no const}$

$L_2=0.0174$

$L=0.0591$



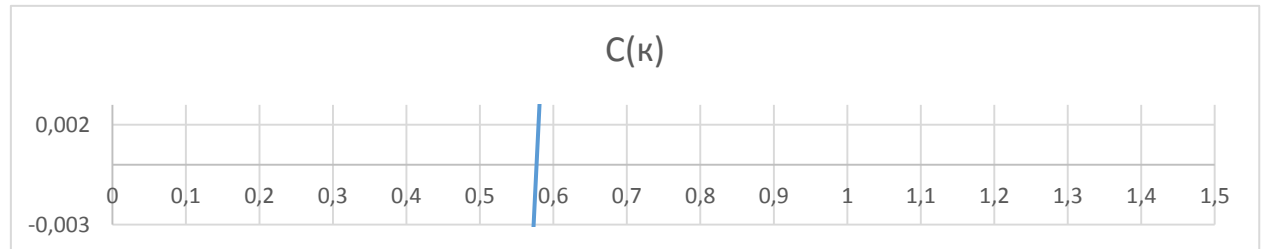
Нечетное решение симметричной ямы с кусочно-постоянной аппроксимацией

$N=50$

$H=\text{const}=0.04$

$L_2=0.0267$

$L=0.2821$



Нечетное решение симметричной ямы с кусочно-непостоянной аппроксимацией

$N=50$

$H= \text{no const}$

$L_2=0.0174$

$L=0.0591$



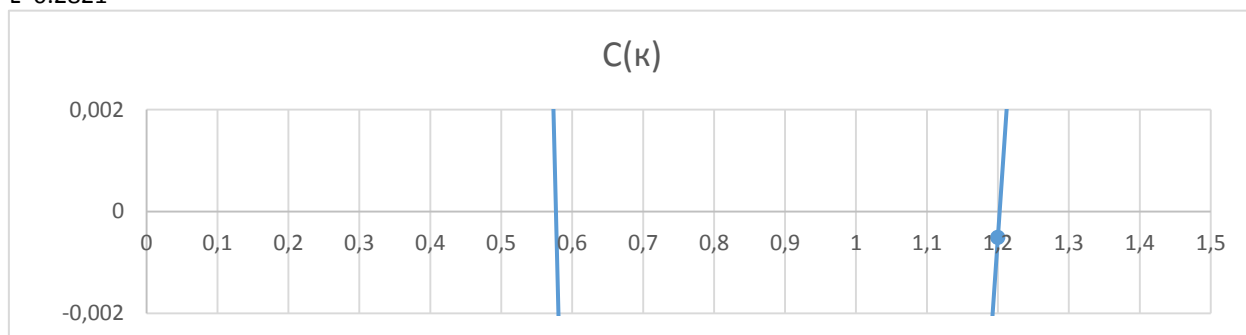
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с постоянным шагом разбиения

N=100

H=const=0.04

L2=0.0377

L=0.2821



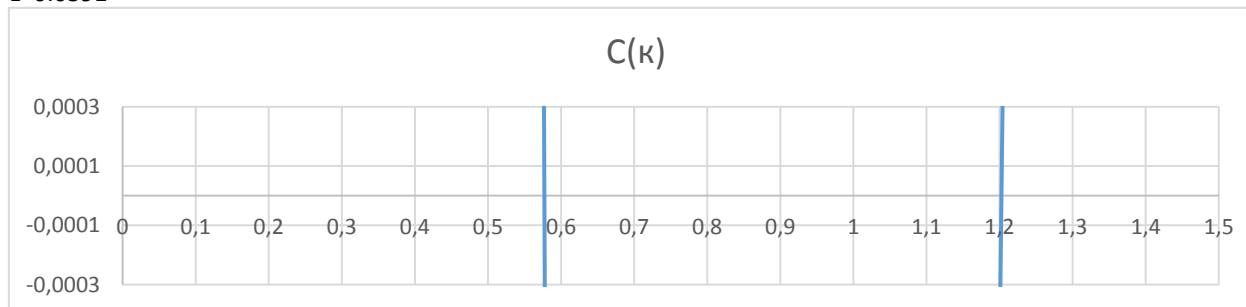
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с непостоянным шагом разбиения

N=100

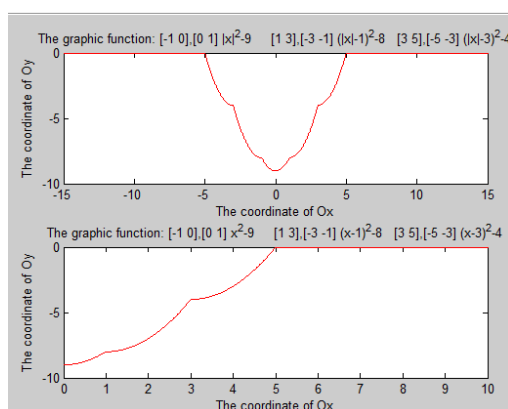
H=no const

L2=0.0228

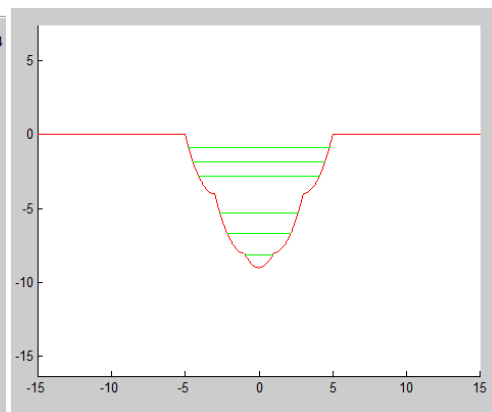
L=0.0591



$$\text{Функция} \begin{cases} x^2 - 9, & x \in (-1; 1) \\ (x - 1)^2 - 8, & x \in (-3; -1] \cup [1; 3) \\ (x - 3)^2 - 4, & x \in [-5; -3] \cup [3; 5] \end{cases}$$



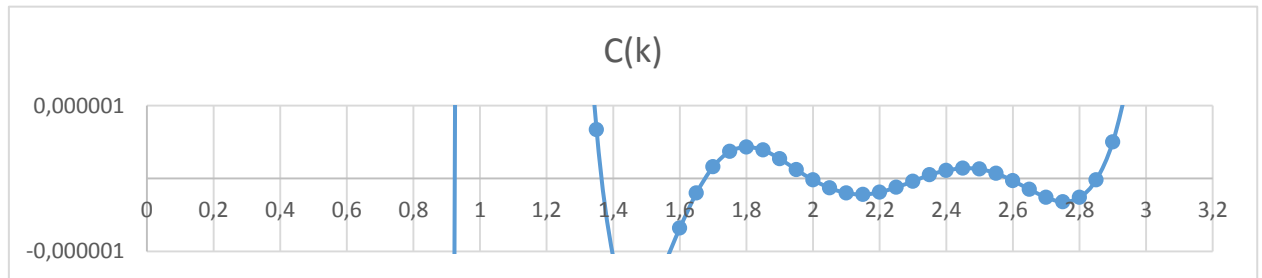
Исходная функция



Уровни энергии

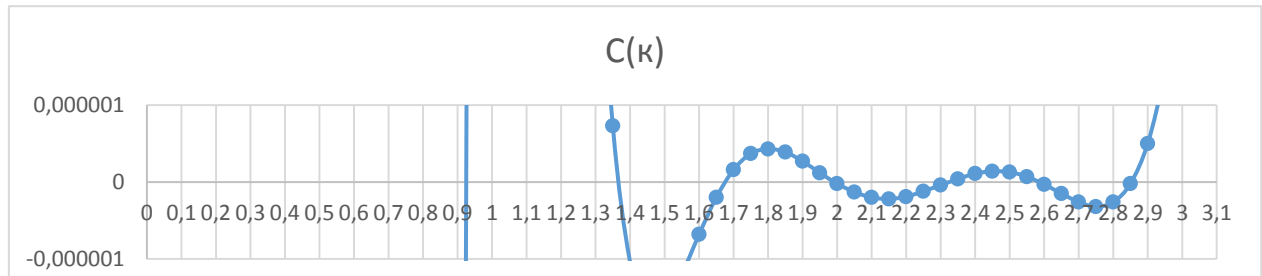
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с постоянным шагом разбиения

N=100
H=const=0.1
L2=0.2031
L=0.2075

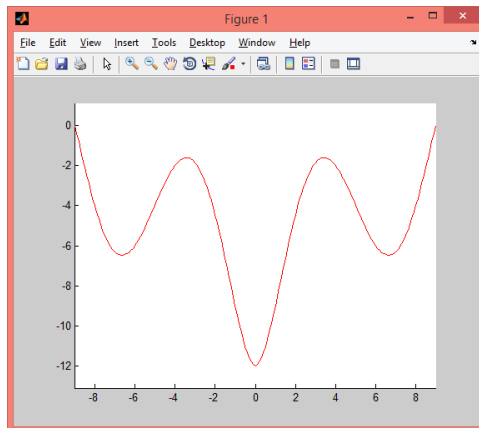


Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с непостоянным шагом разбиения

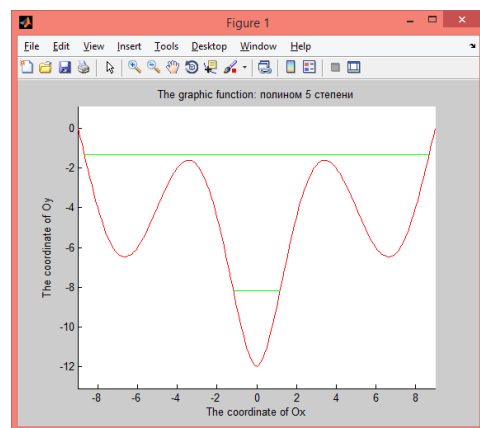
N=100 (20 20 10 10 20 20)
H=no const
L2=0.1669
L=0.144



Функция: полином 5 степени



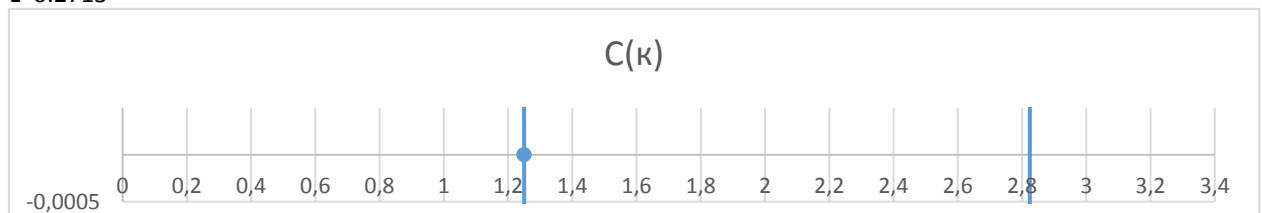
Исходная функция



Уровни энергии

Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с постоянным шагом разбиения

N=100
H=const=0.18
L2=0.3147
L=0.2713



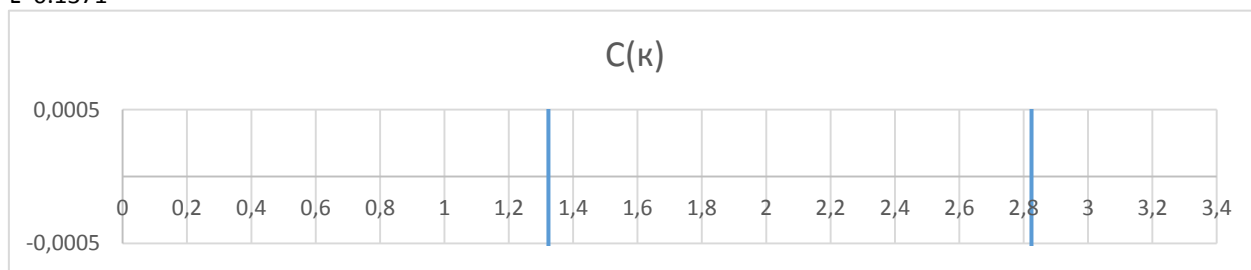
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с непостоянным шагом разбиения

$N=100$

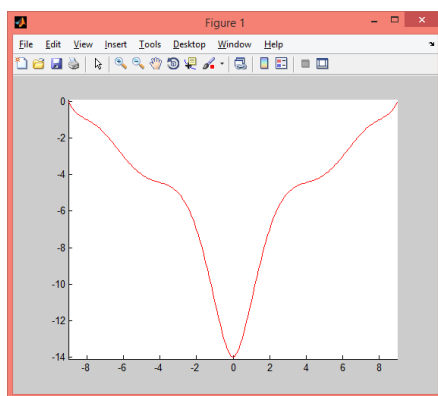
$H=\text{no const}$

$L2=0.2803$

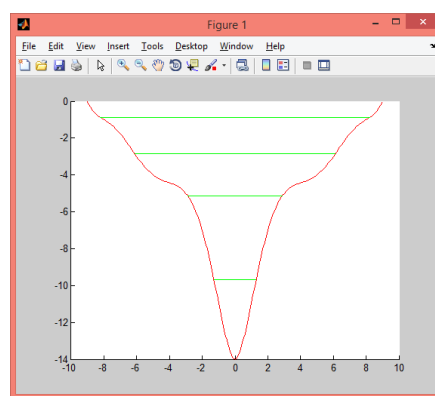
$L=0.1371$



Функция: полином 6 степени



Исходная функция



Уровни энергии

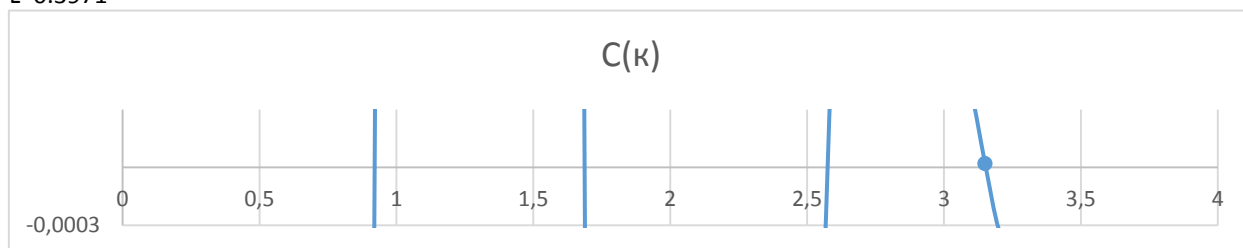
Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с постоянным шагом разбиения

$N=100$

$H=\text{const}=0.18$

$L2=0.44$

$L=0.3971$



Решение спектральной задачи при прохождении всей ямы с непостоянным шагом разбиения

$N=100$

$H=\text{no const}$

$L2=0.3109$

$L=0.2174$

