ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
MATEMATIKOS KATEDRA

Eglė Mikuckytė

Šriodingerio lygties sprendimas „tiltelių“ ir „šaudymo“ metodais

Magistro darbas

Darbo vadovas:
doc. dr. Mindaugas Stakvilevičius

Šiauliai, 2011

TURINYS

ĮVADAS

Naudojantis Mathcad`o programine įranga skaitiniais metodais galima išspręsti daugelį sudėtingų fizikinius procesus aprašančių diferencialinių lygčių. Taip pat galime išspręsti ne tik daugelį fizikos, bet ir matematikos bei technikos uždavinių. Šiais laikais mokslas yra labai pažengęs ir todėl uždavinių sprendimą mums labai palengvina įvairios kompiuterinės technologijos. Diferencialinėms lygtims skaičiuoti kompiuterinės programos naudoja įvairius skaitinius metodus, o jų yra labai daug.

Darbe susiesime dvi skirtingas mokslo sritis – matematiką ir fiziką. Ieškosime fizikoje plačiai naudojamas Šriodingerio lygies tikrinių reikšmių E_n ir tikrinių reikšmių funkcijų $\varphi(x, E_n)$ nestandartiniais metodais. Būtent mažiausių kvadratų metodu ieškosime funkcijų, kurios su pakankamai maža paklaida patenkina ir diferencialinę Šriodingerio lygtį ir kraštines sąlygas, reikalaujančias, kad potencialinės duobės kraštuose sprendiniai pereitų į eksponentinius. Mes išbandėme kelis Šriodingerio lygties sprendimo būdus, atlikdami konkrečius skaičiavimus su įvairaus tipo Šriodingerio lygties potencialinėmis duobėmis.

Ir pačioje duobėje, ir už jos ribų visur turi būti patenkinta Šriodingerio lygtis, tačiau kai duobė užima baigtinį intervalą, už kurio potencinė energija $u(x) = 0$, tada Šriodingerio lygtis skaitiškai sprendžiama tik duobės viduje, pareikalaujant, kad kraštuose būtų patenkintos kraštinės sąlygos. T.y., kad sprendiniai pereitų į mažėjančias eksponentes ir tada tarp sprendinio φ funkcijos ir jos išvestinės φ' kraštiniuose taškuose x_1 ir x_2 turi būti patenkintos sąlygos:

$$\varphi(x_1, E_n) \cdot \sqrt{E}_n = \varphi'(x_1, E_n)$$

ir

$$\varphi(x_2, E_n) \cdot \sqrt{E_n} = -\varphi'(x_2, E_n).$$

1. ŠRIODINGERIO LYGTIS

Šriodingerio lygtis yra pagrindinė kvantinės mechanikos lygtis, kurią 1925 metais pasiūlė austrų fizikas Ervinas Šriodingeris. Ji aprašo kvantinių dalelių elgesį. Ši lygtis yra plačiai žinoma fizikoje. Bendru atveju Šriodingerio lygtis užrašoma taip[4]:

$$\hat{H}\psi(r,t) = i\eta \frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t),$$

čia $\hat{H}$ yra dalelės hamiltonianas, t.y. energijos operatorius, o $\psi(r,t)$ – dalelės banginė funkcija, η – mažoji planko konstanta $\left(\eta = \frac{h}{4\pi}\right)$, i – menamasis vienetas.

Lygtis sprendžiama banginės funkcijos atžvilgiu. Radus ją galime pilnai aprašyti nagrinėjamą dalelę. Būtent dėl to ši lygtis kartais vadinama antrojo Niutono dėsnio analogu kvantiniame pasaulyje. Šriodingerio lygtis yra vienas iš kvantinės mechanikos postulatų – ją galima užrašyti tik pasirėmus įvairias pasamprotavimais apie banginę dalelių prigimtį. Griežto jos išvedimo nėra.

Nereliatyvistinėje kvantinėje mechanikoje hamiltonianas yra tiesiog kinetinės ir potencinės energijų suma. Tokiu atveju Šriodingerio lygtis dalinėmis išvestinėmis atrodo taip:

$$\left[-\frac{\eta^2}{2m}\nabla^2 + U(r,t)\right]\psi(r,t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t), \tag{1}$$

čia ∇^2 yra laplasianas, o $U(r,t)$ – sistemos potencinė energija.

Kaip matyti, ši lygtis yra antrojo laipsnio dalinių išvestinių diferencialinė lygtis, taigi ją išspręsti analiziškai pasiseka tik labai paprastais atvejais.

Mes spręsime tik stacionariąją vienmatę Šriodingerio lygtį, t.y. kai sistemos hamiltonianas priklauso tik nuo vieno kintamojo – atstumo x. Tada galime ieškoti bendrosios Šriodingerio lygties sprendinio kaip laikinės ir koordinatinės priklausomybės funkcijų sandaugos:

$$\psi(r,t) = \phi(r) \cdot A(t).$$

Iš čia gauname tikrinių reikšmių lygtį funkcijai $\phi(r)$:

$$\hat{H} \cdot \phi(r) = E \cdot \phi(r),$$

bei $\mathrm{A}(\mathrm{t})$ sprendinį, su kuriuo banginė funkcija atrodo taip:

$$\psi(r,t) = e^{-\frac{i}{\eta}Et} \cdot \phi(r).$$

Įrašę į (1) lygties dešiniąją pusę, gausime:

$$i\eta \frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = E\phi(r)$$

ir

$$-\frac{\eta^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} + U(x)\phi(x) = E'\phi(x)\ .$$

Įvedus bedimensinius kintamuosius, Šriodingerio lygtis įgyja pavidalą:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \left[E + u(x)\right]\cdot y = 0\ ,$$

čia y – redukuota banginė funkcija, $U(x)$ – reduokuota potencinė energija, E – visos energijos absoliutus dydis.

Šią lygti ir spręsime.

2. ŠRIODINGERIO LYGTIES SPRENDINIŲ SAVYBĖS

Šioje redukuotoje antros eilės diferencialinėje lygtyje

$$y'' - [E + u(x)] \cdot y = 0 \qquad (2)$$

įvedame pažymėjimą, kad

$$g(x) = E + u(x),$$

kur $0 < E < \max(|u(x)|)$,

Tada gauname tokią lygtį

$$y'' - g(x)y = 0.$$

Toje kintamojo x srityje, kur $g(x) > 0$, šios diferencialinės lygties sprendinys yra eksponentės pobūdžio:

$$y \to \cos\left(\sqrt{g(x)} \cdot x + \alpha\right).$$

Tai paaiškina maksimumo ir minimumo savybės.

Panagrinėkime atvėjį, kai $y > 0$.

Jei $y'' > 0$, tada sprendinys yra lokalinio minimumo srityje (eksponentinis pobūdis).

Jei $y'' < 0$, tada lygties (2) sprendinys pereina į maksimumo sritį (harmoninis pobūdis).

Mums reikia rasti tokius sprendinius, kuriems antrajame ribos taške trigonomertinė funkcija pereina į nykstančią eksponentinę funkciją. Čia mazgų skaičius nusako sprendinio E eilės numerį.

3. TIKRINIŲ REIKŠMIŲ IR TIKRINIŲ FUNKCIJŲ RADIMO UŽDAVINYS

Duota diferencialinė lygtis. Reikia iš visų galimų sprendinių išrinkti tokius, kurie patenkintų kraštinės sąlygas:

1 – oji kraštinės sąlyga. Ji gaunama iš reikalavimo, kad sprendinys būtų lygus

$$y(x_1) = Ae^{\sqrt{E}\cdot x_1}, \tag{3}$$

pradedant tašku x_1 ir į kairę pusę. Kad eliminuotume parametrą A apskaičiuojame ir šio sprendinio išvestinę

$$y'(x_1) = A\sqrt{E}e^{\sqrt{E}\cdot x_1}. \tag{4}$$

Iš šių dviejų išraiškų (3) ir (4) gauname, kad

$$\frac{y(x_1)}{y'(x_1)} = \frac{1}{\sqrt{E}}, \tag{5}$$

Iš (5) išraiškos išplaukia, kad

$$y'(x_1) = \sqrt{E}\cdot y(x_1). \tag{6}$$

2 – oji kraštinės sąlyga gaunama analogiškai taške x_2:

$$y(x\ ) = -Be^{-\sqrt{E}\cdot x_2} \tag{7}$$

Kadangi taške x_2 sprendinys yra dešiniau, todėl antroji kraštinės sąlyga bus tokia:

$$y'(x_2) = -\sqrt{E}\cdot y(x_2) \tag{8}$$

Taigi, mes galime rasti tuos diferencialinės lygties sprendinius, kurie patenkina abi kraštinės sąlygas (6), (7). Tos E reikšmės, kurioms šios sąlygos aptenkintos, vadinamos tikrinėmis reikšmėmis. Tos funkcijos, kurios patenkina ir diferencialinę lygtį ir kraštines sąlygas, vadinamos tikrinėmis funkcijomis. Mūsų uždavinys yra surasti ir visas tikrines reikšmes, ir visas tikrines funkcijas.

4. UŽDAVINIO FORMULAVIMAS

Redukuota Šriodingerio lygtis vienmačiu stacionariu atveju yra 2-osios eilės diferencialinė lygtis (2), čia $u(x)$ yra potencinė energija.

Ši lygtis yra duota su potencinės energijos priklausomybe nuo kordinatės ir neapibrėžtu parametru E – energija, kurią turinti dalelė gali egzistuoti potencinėje duobėje $x_1 < x < x_2$. Sprendžiant lygtį reikia rasti tas tikrines parametro E reikšmes, su kuriomis sprendinys tenkina kraštines sąlygas. Tai yra, reikia išspręsti, kai duota $u(x)$ išraiška, tikrinių reikšmių uždavinį.

Kraštinės sąlygos: kraštiniame taške x_1 yra:

$$y'(x_1) + \sqrt{E} \cdot y(x_1) = 0,$$

kitame kraštiniame taške – x_2, kai $x_2 > x_1$, kraštinės sąlyga yra:

$$y'(x_2) - \sqrt{E} \cdot y(x_2) = 0.$$

O už intervalo x_1 ir x_2 ribų, kur potencinė energija lygi nuliui, galime šią lygtį išspręsti standartiniais metodais. Gauname, kad už intervalo ribų bus eksponentės, t. y. kairėje pusėje:

$$y = A \cdot e^{\sqrt{E}x}$$

ir dešinėje pusėje:

$$y = B \cdot e^{-\sqrt{E}x}.$$

Vadinas, intervalo x_1 ir x_2 kraštuose turi būti patenkintos kraštinės sąlygos, kad sprendinys pereitų į eksponentes. Taigi reikia ne tik išspręsti pačią diferencialinę lygtį, bet taip pat rasti parametro E tikrines reikšmes.

Uždavinį sprendėme šiais metodais: 1) „šaudymo“ metodu ir 2) „tiltelių“ metodu. Aproksimavimui naudojome dviejų rūšių tiltų funkcijas: hiperbolines ir trigonometrines funkcijas. Išsprendę uždavinį trim mūsų pasiūlytais metodais, jo tikslumą įvertinome sprędami diferencialinę lygtį skaitiniu Rungės ir Kutos metodu (priedo 4 psl.). Tai padarėme jau žinodami Šriodingerio lygties tikrines E reikšmes.

5. MAŽIAUSIŲ KVADRATŲ METODO ESMĖ

Tarkime, kad yra x_n taškų verčių, kurių kiekvienai matavimo prietaise nustatyta y_n reikšmė. Kadangi kiekvienas realus prietaisas matuoja su paklaida, tai tas matavimo paklaidas stengiamasi aprašyti bendra $y = f(x)$ priklausomybe taip, kad paklaidos būtų kaip galima mažesnės. Tuo tikslu siūlome sukurti konkrečią aproksimavimo funkciją $f(x, a_0, a_1, a_2 ..., a_k)$ su neapibrėžtais parametrais, tokią, kad tos funkcijos skirtumų su išmatuotomis reikšmėmis kvadratų suma būtų minimali, t.y. sukuriama paklaidos funkcija (optimizavimo funkcija)[1]:

$$F(x, a_0, a_1, ..., a_k) = \frac{1}{N} \sum_{n=1} [f(x_n, a_0, ..., a_k) - y_n]^2 \ , \qquad (9)$$

kurios suma būtų minimali. Ši funkcija iš tikrųjų yra paklaidų kvadratų vidurkis (dispersija).

Toliau surandame tas $a_0, a_1, ..., a_k$ reikšmes, kurioms paklaidos funkcija (optimizavimo funkcija) yra minimali. Tuo atveju kai į aproksimavimo funkciją koeficentai prie f_n $a_0, a_1, ..., a_k$ įeina tik tiesiškai, paklaidos funkcijos minimumas nusakomas iš sąlygos, kad visos dalinės paklaidos funkcijos išvestinės pagal neapibrėžtus parametrus yra lygios nuliui, t.y.:

$$\frac{\partial F}{\partial a_k} = 0.$$

Tarkime, kad funkcija $f(x, a_0, a_1, a_2 ..., a_k)$ yra tokia, kad

$$f(x, a_0, a_1, a_2 ..., a_k) = \sum_k a_k \varphi_k(x), \qquad (10)$$

kur $\varphi(x)$ yra tos funkcijos, kurių tiesinė kombinacija išreiškima aproksimavimo funkcija. Įrašome (10) į (9):

$$F(a) = \frac{1}{N} \sum_n \left[\sum_k a_k \varphi_k(x_n) - y_n \right]^2 .$$

Užrašome konkrečiai:

$$F(a)=\frac{1}{N}\sum_{n}\left[\sum_{k=0}a_k\varphi_k(x_n)-y_n\right]\cdot\left[\sum_{l=0}a_l\varphi_l(x_n)-y_n\right].$$

Tada šią išraišką diferencijuojame. Diferencijuodami gauname, kad

$$\frac{\partial F}{\partial a_k}=\frac{2}{N}\sum_{n}\varphi_k(x_n)\left[\sum_{k}a_k\varphi_k(x_n)-y_n\right]=0\,.$$

Taigi gauname tiesinių lygčių sistemą, kai $k=0..K$, tokią, kad suprastinę iš 2 gauname:

$$\sum_{n}\varphi_k(x_n)\sum_{l}a_l\varphi_l(x_n)=\sum_{n}y_l\varphi_k(x_n)\,.$$

Tai yra tiesinė nehomogeninė algebrinių lygčių sistema su nežinomaisiais parametrais a_l .

Šios lygčių sistemos kairiosios pusės matrica $A_{k,l}$ yra lygi

$$A_{k,l}=\sum_{n=0}^{N}\varphi_k(x_n)\cdot\varphi_l(x_n)$$

ir dešiniosios pusės matrica B_k yra lygi

$$B_k=\sum_{n=0}^{N}\varphi_k(x_n)\cdot y_n\,.$$

Išsprendę šią algebrinę lygčių sistemą randame neapibrėžtus parametrus a_k , kuriais išreiškiame aproksimavimo funkciją (10).

Šiame darbe pritaikėme dvi naujoves:

1. mes aproksimuojame ne eksperimento rezultatus, o ieškome aproksimavimo funkcijos, kuri įmanomai tiksliau nusakytų Šriodingerio lygties sprendinius ir tų sprendinių kraštines sąlygas. Tuo tikslu sudarome paklaidos funkciją, kurios viena dalis lygi diferencialinės lygties sprendinių kvadratų sumai dideliam taškų skaičiui. Kita dalis su tam tikru svoriu gaunama iš kraštinių sąlygų.

2. įvedame formulėje (10)

$$F(x, a_0, a_1, ..., a_k) = \sum_n a_k \varphi_k(x)$$

aproksimavimo komponentes $\varphi_k(x)$. Paprastai tai būna polinomo nariai $y_k(x) = x^k$ vienodi visam argumentų kitimo intervalui. Mes pasirenkame aproksimavimo komponentes tokiu būdu:

$$\varphi_{k,l}(x) = suo(x, x_l, ...) \cdot \left(\frac{x - X_l}{p} \right)^k, \qquad (11)$$

čia suo – „tilto“ funkcija, p – yra „tilto“ pusplotis, x_l - „tilto“ centrų koordinatės, k – aproksimavimo funkcijos koeficientas.

6. RUNGĖS IR KUTOS METODAS

Sprendžiame lygtį $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$. Ieškome sprendinio $y = y(x)$ apytikslių reikšmių $y_i = y(x_i)$, $i = 1,2,...,n$. Funkciją $y(x)$ (sprendinį) išreiškiame Teiloro eilute x_k aplinkoje

$$y(x) = y_k + y'_k(x - x_k) + \frac{y''_k}{2!}(x - x_k)^2 + \frac{y'''_k}{3!}(x - x_k)^3 + ... \qquad (12)$$

Paėmę penkis narius ir vietoje x įrašę x_{k+1}, gauname:

$$y_{k+1} = y_k + \lambda_k ,$$

čia

$$\lambda_k = y'_k \cdot h + \frac{y''_k}{2} \cdot h^2 + \frac{y'''_k}{6} \cdot h^3 + \frac{y^{IV}_k}{24} \cdot h^4 .$$

Kuta pasiūlė tokią λ_k išraišką:

$$\lambda^*_k = h \cdot (b_1 l_1 + b_2 l_2 + b_3 l_3 + b_4 l_4),$$

čia

$$l_1 = f(x_k, y_k),\ l_2 = f(x_k + c_2 \cdot h, y_k + h \cdot a_{21} \cdot l_1),$$

$$l_3 = f(x_k + c_3 \cdot h, y_k + h \cdot (a_{31} \cdot l_1 + a_{32} \cdot l_2)),$$

$$l_4 = f(x_k + c_4 \cdot h, y_k + h \cdot (a_{41} \cdot l_1 + a_{42} \cdot l_2 + a_{43} \cdot l_3)).$$

Visi koeficientai $b_1, b_2, b_3, b_4, c_2, c_3, c_4$ ir $a_{21}, a_{31}, a_{32}, a_{41}, a_{42}, a_{43}$ - realieji skaičiai. Šie koeficientai turi būti parinkti taip, kad $\lambda^*_k = \lambda_k$.

Užrašę šią sąlygą išreikštiniu pavidalu, gausime aštuonių lygčių sistemą. Kadangi lygčių lygčių susidaro mažiau negu koeficientų, todėl galimi įvairūs šių koeficientų rinkiniai. Dažniausiai naudojamos tokios koeficientų reikšmės:

$$b_1 = b_4 = \frac{1}{6},\ b_2 = b_3 = \frac{1}{3},\ c_2 = c_3 = \frac{1}{2},$$

$$c_4 = 1,\ a_{21} = \frac{1}{2},\ a_{31} = 0,\ a_{32} = \frac{1}{2},\ a_{41} = a_{42} = 0,\ a_{43} = 1.$$

Tada

$$\lambda_k^* = \frac{h}{6} \cdot \left(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4\right),$$

o l_1, l_2, l_3, l_4 apskaičiuojame pagal formules:

$$l_1 = f\left(x_k, y_k\right),\ l_2 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2} \cdot l_1\right),$$

$$l_3 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2} \cdot l_2\right),\ l_4 = f\left(x_k + h, y_k + h \cdot l_3\right).$$

Taigi, turėdami l_1, l_2, l_3, l_4, apskaičiuojame $k+1$-ojo taško ordinatę:

$$y_{k+1} = y_k + \lambda_k^*,$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6} \cdot \left(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4\right),\ k = \overline{0, n-1}. \tag{13}$$

Šio metodo paklaida yra proporcinga h^5, nes (12) Teiloro eilutėje ėmėme penkis narius (iki h^4). Taigi metodas yra ketvirtos eilės Rungės ir Kutos metodas. Kadangi tai dažniausiai praktikoje taikomas metodas, jis tiesiog vadinamas Rungės ir Kutos metdu [5].

7. SPRENDIMO ALGORITMŲ REALIZAVIMAS

Šios redukuotos Šriodingerio lygties (2) sprendinio ieškojome šiais būdais:

1) etapas. Žvalgybinis: Tikrinių E reikšmių srities nustatymas trim būdais:

1. aproksimavimui naudojome hiperbolinio tangento „tiltų“ funkcijas,

2. aproksimavimui naudojome trigonometrines „tiltų“ funkcijas,

3. „šaudymo“ metodu.

2) etapas. Patikslinimo metodai: Tikrines E reikšmes patikslinome naudodami mišrius metodus.

1. Aproksimavimui naudojome hiperbolinio tangento „tiltų“ funkcijas. Toliau vadinsime hs funkcija. hs funkcija atrodo taip:

$$hsuo(x, g, p, h) = \frac{1}{2} \cdot \left(th\left(\frac{x-g+p}{h}\right) - th\left(\frac{x-g-p}{h}\right)\right), \tag{14}$$

čia g – hs „tilto“ centro koordinatė, p – hs „tilto“ pusplotis, h – hs „tilto“ galų nuožulnumas.

Hs funkcijos pagrindinės savybės [5]:

1) sumos:

$$hsuo(x, x_1, h, x_2 - x_1) + hsuo(x, x_2, h, x_3 - x_{21}) = hsuo(x, x_2, h, x_3 - x_1).$$

Sugretinus N „tiltų“, gauname vieną, kurio „tilto“ plotis N kartų didesnis, t.y.:

$$\sum_{n=1}^{N} hsuo(x, g, h, 2np) = hsuo(x, g, h, Np).$$

2) išvestinės:

Pasižymime $y(x) = hsuo(x, g, h, p)$, tada:

$$\frac{dy}{dx} = y'(x) = \frac{1}{2h} \cdot \left(-th\left(\frac{x-g+p}{h}\right)^2 + th\left(\frac{x-g-p}{h}\right)^2\right)$$

ir

$$\frac{d^2y}{dx^2} = y'(x) = \frac{1}{h^2} \cdot \left(-th\left(\frac{x-g+p}{h}\right) + th\left(\frac{x-g-p}{h}\right) + th\left(\frac{x-g+p}{h}\right)^3 - th\left(\frac{x-g-p}{h}\right)^3\right).$$

3) integralo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} hsuo(x, g, h, p)dx = 2p.$$

Sprendinio ieškome

$$z(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot hsuo\left(\frac{x-X_l-p}{h}\right), \qquad (15)$$

čia „tilto“ funkcija yra tokio (6) pavidalo.

Šio metodo prasmė: suskaidome visą sritį į atskiras persidengiančias zonas (tiltus) ir kiekvienoje taikome atskirą aproksimavimo polinomą. Bendras sprendinys yra lygus atskirų polinomų, padaugintų iš tilto funkcijų, sumai. Tokiu pavidalu ieškome sprendinio.

Paskaičiuosime išvestines (7) lygties:

$$z'(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left[\frac{n}{p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}+\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot y'(x)\right],$$

$$z''(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left[\frac{n(n-1)}{p^2}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-2}+\frac{2n}{p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}\cdot y'(x)+\frac{1}{h^2}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot y''(x)\right].$$

Įrašome aproksimavimo funkciją į diferencialinę lygtį (į Šriodingerio lygtį) ir gauname:

$$\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left\{\frac{n(n-1)}{p^2}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-2}\cdot hsuo(x,g,p,h)+\frac{2n}{p}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}\cdot hsuo1(x,g,p,h)+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot hsuo2(x,g,p,h)+(-u(x)-E)\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^2 hsuo(x,g,p,h)\right\}=0\,.$$

Ši lygtis turi būti įmanomai tiksliau patenkinta kraštiniamsintervalo x_1 ir x_2 taškams x_t. Kad taip būtų, iš mažiausių kvadratų metodo teorijos seka, kad šios lygčių sistemos, kai $l=0..L$ ir $n=0..N$ kairiosios pusės matrica būtų tokia

$$A(E)=\left\lfloor a0+b0+\sqrt{E}\cdot b05+E\cdot(b1-a1)+E^2\cdot a2\right\rfloor,$$

kurioje

$$a0=\frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left[y2(m,1,x_t)\cdot y2(n,j,x_t)-\left(y2(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\,y2(n,j,x_t)\cdot y0(m,1,x_t)\right)\cdot u(x_t)+u(x_t)^2\cdot y0(m,1,x_t)y0(n,j,x_t)\right],$$

$$a1=\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\left[y2(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)+\left(y2(n,j,x_t)\cdot y0(m,1,x_t)-\right.\right.$$

$$\left.\left.-\,2u(x_t)\cdot y0(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)\right)\right),$$

$$a2=\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\left[y0(m,1,x_t)(y0(n,j,x_t)\right)),$$

$$b0=\left(y1(m,1,X1)\cdot y1(n,j,X1)+y1(m,1,X2)\cdot y1(n,j,X2)\right)\cdot Qb\,,$$

$$b05=\left(y1(m,1,X2)\cdot y0(n,j,X2)+y0(m,1,X2)\cdot y1(n,j,X2)-y1(m,1,X1)\cdot y0(n,j,X1)-\right.$$
$$\left.-\,y0(m,1,X1)\cdot y1(n,j,X1)\right)\cdot Qb\,,$$
$$b1=\left(y0(m,1,X1)\cdot y0(n,j,X1)+y0(m,1,X2)\cdot y0(n,j,X2)\right)\cdot Qb\,.$$

Kadangi gauta mažiausių kvadratų metodų lygčių sistema

$$A(E)\cdot C_{l,n}\ =0$$

yra homogeninė, tai ji turės parametrų $C_{l,n}$ nenulinius sprendinius tik toms E reikšmėms, kurioms matricos determinantas A(E) bus lygus nuliui.

Kadangi aproksimavimo funkcija nėra absoliučiai tikslus sprendinys, tai ir determinantas nebus tiksliai lygus nuliui. Todėl ieškosime jo absoliučios reikšmės minimumų.

2**.** Aproksimavimui naudojome trigonometirnes „tilto“ funkcijas. Toliau vadinsime ts funkcija. ts funkcija atrodo taip:

$$tsuo(x,g,p)=\cos\left(\pi\frac{x-g}{2p}\right)^2, \qquad (16)$$

čia g – ts „tilto“ centro koordinatė, p – ts „tilto“ pusplotis.

ts funkcijos pagrindinės savybės[5]:

1) sumos:

$$tsuo\left(x,x_1,x_2-x_1\right)+tsuo\left(x,x_2,x_3-x_{21}\right)=tsuo\left(x,x_2,x_3-x_1\right).$$

Sugretinus N „tiltų“, gauname vieną, kurio „tilto“ plotis N kartų didesnis, t.y.:

$$\sum_{n=1}^{N}tsuo(x,g,2np)=hsuo(x,g,Np).$$

2) išvestinės:

Pasižymime $y(x)=tsuo(x,g,p)$, tada:

$$\frac{dy}{dx}=y'(x)=\frac{-\pi}{2p}\cdot\sin\left(\pi\frac{x-g}{p}\right)$$

ir

$$\frac{d^2y}{dx^2}=y'(x)=\frac{-\pi^2}{2p^2}\cdot\cos\left(\pi\frac{x-g}{p}\right).$$

3) integralo:

$$\int_{-\infty}^{\infty}tsuo(x,g,p)dx=2p\,.$$

Sprendinio ieškome

$$z(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot tsuo\left(\frac{x-X_l-p}{h}\right), \tag{17}$$

čia „tilto“ funkcija yra tokio (6) pavidalo.

Šio metodo prasmė: suskaidome visą sritį į atskiras zonas (tiltus) ir kiekvienoje taikome atskirą aproksimavimo polinomą. Bendras sprendinys yra lygus atskirų polinomų, padaugintų iš „tilto“ funkcijų, sumai. Tokiu pavidalu ieškome sprendinio.

Paskaičiuosime išvestines (7) lygties:

$$z'(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left[\frac{n}{p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}+\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot y'(x)\right],$$

$$z''(x)=\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left[\frac{n(n-1)}{p^2}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-2}+\frac{2n}{p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}\cdot y'(x)+\frac{1}{h^2}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot y''(x)\right].$$

Įrašome aproksimavimo funkciją į diferencialinę lygtį (į Šriodingerio lygtį) ir gauname:

$$\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}C_{l,n}\left\{\frac{n(n-1)}{p^2}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-2}\cdot tsuo(x,g,p,h)+\frac{2n}{p}\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{n-1}\cdot tsuo1(x,g,p,h)+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^n\cdot tsuo2(x,g,p,h)+(-u(x)-E)\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^2\cdot tsuo(x,g,p,h)\right\}=0\,.$$

Ši lygtis turi būti įmanomai tiksliau patenkinta kraštiniamsintervalo x_1 ir x_2 taškams x_t. Kad taip būtų, iš mažiausių kvadratų metodo teorijos seka, kad šios lygčių sistemos, kai $l=0..L$ ir $n=0..N$ kairiosios pusės matrica būtų tokia

$$A(E)=\left[a0+b0+\sqrt{E}\cdot b05+E\cdot(b1-a1)+E^2\cdot a2\right],$$

kurioje

$$a0=\frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left[y2(m,1,x_t)\cdot y2(n,j,x_t)-\left(y2(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\,y2(n,j,x_t)\cdot y0(m,1,x_t)\right)\cdot u(x_t)+u(x_t)^2\cdot y0(m,1,x_t)y0(n,j,x_t)\right],$$

$$a1=\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\left[y2(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)+\left(y2(n,j,x_t)\cdot y0(m,1,x_t)-\right.\right.$$

$$\left.\left.-\,2u(x_t)\cdot y0(m,1,x_t)\cdot y0(n,j,x_t)\right)\right),$$

$$a2=\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\left[y0(m,1,x_t)\left(y0(n,j,x_t)\right)\right),$$

$$b0=\left(y1(m,1,X1)\cdot y1(n,j,X1)+y1(m,1,X2)\cdot y1(n,j,X2)\right)\cdot Qb\,,$$

$$b05=\left(y1(m,1,X2)\cdot y0(n,j,X2)+y0(m,1,X2)\cdot y1(n,j,X2)-y1(m,1,X1)\cdot y0(n,j,X1)-\right.$$

$$-y0(m,1,X1)\cdot y1(n,j,X1))\cdot Qb,$$

$$b1=\left(y0(m,1,X1)\cdot y0(n,j,X1)+y0(m,1,X2)\cdot y0(n,j,X2)\right)\cdot Qb.$$

Kadangi gauta mažiausių kvadratų metodų lygčių sistema

$$A(E)\cdot C_{l,n}=0$$

yra homogeninė, tai ji turės parametrų $C_{l,n}$ nenulinius sprendinius tik toms E reikšmėms, kurioms matricos determinantas A(E) bus lygus nuliui.

Kadangi aproksimavimo funkcija nėra absoliučiai tikslus sprendinys, tai ir determinantas nebus tiksliai lygus nuliui. Todėl ieškosime jo absoliučios reikšmės minimumų.

3. „Šaudymo“ metodo esmė: pasirenkame ieškomos funkcijos reikšmę pirmajame kraštiniame taške x_1 savo nuožiūra. Šiame darbe pradinę reikšmę parenkame priklausomai nuo to, kaip staigiai auga diferencialinės lygties sprendinys.

Šriodingerio lygtyje priskiriame parametro rekšmę $\sqrt{E}$. Iš pirmosios kraštinės sąlygos

$$y=Ae^{\sqrt{E}x}$$

ir

$$y'=A\sqrt{E}e^{\sqrt{E}x}$$

gauname, kad

$$y'(x_1)-\sqrt{E}y(x_1)=0 \qquad (18)$$

ir sprendžiame diferencialinę lygtį su papildoma kraštine sąlyga (3).

$$\frac{d^2y}{dx^2}-u(x)y=Ey$$

skaitiniu metodu iki antrojo kraštinio taško x_2, kuriame turėtų būti patenkinta antroji kraštinė sąlyga

$$y'(x_2)+\sqrt{E}y(x_2)=0 \qquad (19)$$

Antrajame kraštiniame taške suformuluojama paklaidos funkcija

$$q(E)=y'(x_2)+\sqrt{E}y(x_2) \qquad (20)$$

tai yra paskaičiuojama, kokiu mastu nepatenkinta antroji kraštinė sąlyga (20). Toliau, varijuojant *E,* ieškoma tokios jos reikšmės, kad funkcija

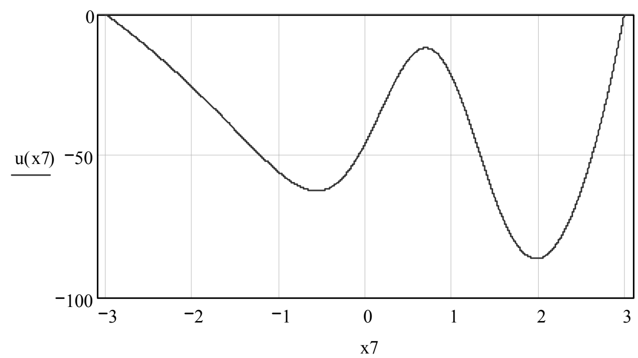
$$q(E)\to 0.$$

Pasirinkto metodo tikrinės E reikšmės uždavinys suvedamas į netiesinės algebrinės lygties

$$y'(x_2) + \sqrt{E}\, y(x_2) = 0 \qquad (21)$$

sprendinio E suradimo uždavinį. Tikrinė reikšmė E, tenkinanti (21) lygtį, gali būti ne viena. Todėl pirmuoju etapu apytiksliai nustatome tas vietas, kur paklaidos funkcija *q(E)* keičia ženklą. Po to kiekvieno ieškomo sprendinio aplinkoje įvedama papildoma sąlyga, nusakanti, kokiuose E intervaluose ieškoti patikslintų sprendinių.

Pasirinktoji potencialinė duobė yra tokio pavidalo:



Varijuojame E intervale nuo 0 iki E maksimalios reikšmės

Kad įsitikintume ar mūsų pritaikytais metodais gauti rezultatai yra pakankamai tikslūs, Šriodingerio lygį su jau rastomis tikrinėmis reikšmėmis sprendėme Rungės ir kutos metodu.

8. UŽDAVINIO SPRENDIMO HIPERBOLINIO TANGENTO „TILTAIS“ MATRICŲ SUDARYMO PROGRAMA

Redukuota Šriodingerio lygtis vienmačiu stacionariu atveju yra 2-osios eilės diferencialinė lygtis (2). Pažymėje vieną aproksimavimo funkcijos (7)

$$y(x) = \sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} C_{l,n}\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^n \cdot suo\left(\frac{x - X_l - p}{h}\right)$$

komponentę (5)

$$z_{l,n}(x_m) = suo(x, x_l, ...)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^m,$$

o jos antrąją išvestinę $z''_{l,n}(x_m)$, pareikalaujam:

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}\left[z''_{l,n}(x_m) - (u(x_m) + E)\cdot z_{l,n}(x_m)\right]\cdot C_{l,n} = 0 .$$

Mums reikia, kad šių paklaidų kvadratų suma, t.y.,paklaidų funkcija, būtų minimali:

$$F(C) = \sum_{m=0}^{M}\left\{\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} z''_{l,n}(x_m) - [u(x_m) + E]\cdot z_{l,n}(x_m)\cdot C_{l,n}\right\}^2 .$$

Paklaidos funkciją išreikšimem per dviejų sumų sandaugą:

$$F(C) = \sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}\left[z''_{l,n}(x_m) - [u(x_m) + E]\cdot z_{l,n}(x_m)\right]\cdot\sum_{j=0}^{J}\sum_{k=0}^{K}\left[z''_{j,k}(x_m) - [u(x_m) + E]\cdot z_{j,k}(x_m)\right]\cdot C_{l,n}\cdot C_{j,k} .$$

Reikia rasti šios funkcijos minimumą. Kad ši funkcija būtų minimali, reikia, kad dalinės išvestinės būtų lygios 0, t.y.:

$$\frac{\partial F(C)}{\partial C_{j,k}} = 0 .$$

Tada gausime

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N}\left[z''_{l,n,m}(x_m) - u_m(x_m)\cdot z_{l,n,m} - (x_m)E\cdot z_{l,n,m}(x_m)\right]\cdot C_{l,n}\cdot\left[z''_{j,k,m}(x_m) - \right.$$
$$\left. u_m(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) - E\cdot z_{l,n,m}(x_m)\right] = 0 .$$

Gauname tiesines lygtis $C_{l,n}$ atžvilgiu, kurių koeficentai prie nežinomųjų yra:

$$a_{l,n,j,k} = \sum_{m=0}^{M}\left\{z''_{l,n,m}(x_m) z''_{j,k,m}(x_m) - u_m(x_m)\cdot z''_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) - E\cdot z''_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) - \right.$$
$$- u_m(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z''_{j,k,m}(x_m) + + u_m^2(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) + + u_m(x_m)\cdot E\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) -$$
$$\left. - E\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z''_{j,k,m}(x_m) + u_m(x_m)E\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) + + E^2\cdot z_{l,n,m}\cdot z_{j,k,m}\right\}.$$

Kadangi Mathcad'o pakete negalime operuoti su trečio rango tenzoriais, turinčiais jau ne 2, o 3 indeksus, tai kol parametro E reikšmė nepriskirta, tenka bendrąją matricą $A_{l,m}$ formuoti iš trijų sudedamųjų:

$$a0 = \sum_{m=0}^{M} z''_{l,n,m}(x_m) z''_{j,k,m}(x_m) - u_m(x_m)\cdot z''_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) - u_m(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z''_{j,k,m}(x_m) +$$

$$+ u_m^2(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m),$$

$$a1 = E\sum_{m=0}^{M} z''_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) + u_m(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m) - z_{l,n,m}(x_m)\cdot z''_{j,k,m}(x_m) +$$

$$+ u_m(x_m)\cdot z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m),$$

$$a2 = E^2\sum_{m=0}^{M} z_{l,n,m}(x_m)\cdot z_{j,k,m}(x_m).$$

Šias matricas gausime iš reikalavimo, kad būtų patenkinta diferencialinė lygtis.

O dabar suformuojam kitą dalį matricos iš reikalavimo, kad būtų patenkintos kraštinės sąlygos. Kairėje pusėje

$$y(x) = A\cdot e^{\sqrt{E}x}, \qquad (22)$$

tada

$$y'(x) = A\cdot\sqrt{E}\cdot e^{\sqrt{E}x}. \qquad (23)$$

Iš (20) galime išreikšti $A = \frac{y(x)}{e^{\sqrt{E}x}}$ ir įrašom į (23) lygtį, tada gauname

$$y'(x) = \frac{y(x)}{e^{\sqrt{E}x}}\cdot\sqrt{E}\cdot e^{\sqrt{E}x}.$$

Suprastinę gauname $y'(x) = y(x)\cdot\sqrt{E}$. Iš to išeina, kad

$$y'(x_1) - y(x_1)\cdot\sqrt{E} = 0$$

ir analogiškai dešinėje pusėje

$$y'(x_2) + y(x_2)\cdot\sqrt{E} = 0.$$

Rašome reikalavimą, kad sprendinys

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_1) - \sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_1)\right] = 0$$

patenkintų kairiąją kraštinę sąlygą. Ir vėl formuojame paklaidos funkciją:

$$F2(C) = \sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_1) - \sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_1)\right]\sum_{j=0}^{J}\sum_{k=0}^{K} C_{j,k}\left[z'_{j,k}(x_1) - \sqrt{E}\cdot z_{j,k}(x_1)\right].$$

Tada paklaidos funkcijos išvestinė $\frac{\partial F2(C)}{\partial C_{j,k}} = 0$, gauname

$$\sum_{m=0}^{M} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_1)-\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_1)\right]\cdot\left[z'_{j,k}(x_1)-\sqrt{E}\cdot z_{j,k}(x_1)\right]=0 .$$

Gauname tokią matricą:

$$b=z'_{l,n}(x_1)\cdot z'_{j,k}(x_1)-\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_1)\cdot z'_{j,k}(x_1)-\sqrt{E}\cdot z'_{l,n}(x_1)\cdot z_{j,k}(x_1)+E\cdot z_{l,n}(x_1)\cdot z_{j,k}(x_1).$$

Tada rašome reikalavimą, kad sprendinys patenkintų antrąją kraštinę sąlygą:

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_2)\right]=0 .$$

Ir vėl formuojame paklaidos funkciją:

$$F3(C)=\sum_{m=0}^{M}\sum_{l=0}^{L}\sum_{n=0}^{N} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_2)\right]\sum_{j=0}^{J}\sum_{k=0}^{K} C_{j,k}\left[z'_{j,k}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{j,k}(x_2)\right].$$

Tada paklaidos funkcijos išvestinė $\dfrac{\partial F3(C)}{\partial C_{j,k}}=0$, gauname

$$\sum_{m=0}^{M} C_{l,n}\left[z'_{l,n}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_2)\right]\cdot\left[z'_{j,k}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{j,k}(x_2)\right]=0 .$$

Gauname tokią matricą:

$$b=z'_{l,n}(x_2)\cdot z'_{j,k}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_2)\cdot z'_{j,k}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z'_{l,n}(x_2)\cdot z_{j,k}(x_2)+E\cdot z_{l,n}(x_2)\cdot z_{j,k}(x_2).$$

Kadangi vėl Mathcad'o pakete negalime operuoti su trečio rango tenzoriais, turinčiais jau ne 2, o 3 indeksus, tai kol parametro E reikšmė nepriskirta, tenka bendrąją matricą $B_{l,m}$ formuoti iš trijų sudedamųjų:

$$b0=z'_{l,n}(x_1)\cdot z'_{j,k}(x_1)+z'_{l,n}(x_2)\cdot z'_{j,k}(x_2),$$

$$b05=-\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_1)\cdot z'_{j,k}(x_1)-\sqrt{E}\cdot z'_{l,n}(x_1)\cdot z_{j,k}(x_1)+\sqrt{E}\cdot z_{l,n}(x_2)\cdot z'_{j,k}(x_2)+\sqrt{E}\cdot z'_{l,n}(x_2)\cdot z_{j,k}(x_2),$$

$$b1=E\cdot z_{l,n}(x_1)\cdot z_{j,k}(x_1)+E\cdot z_{l,n}(x_2)\cdot z_{j,k}(x_2).$$

Tada sujungiame visas a ir b matricas į vieną $A(E)$ matricą.

Kadangi paklaidos funkcija lygi $F(C)=F1(x)+F2(x)$ tai bendra minimumo sąlygos matrica bus lygi tų matricų sumai

$$A(E)=\left[a0+b0+\sqrt{E}\cdot b05+E\cdot(b1-a1)+E^2\cdot a2\right].$$

Analogiškai yra sudaromos matricos sprendžiant trigonometrinių „tiltų“ metodu.

9. TIKRINIŲ FUNKCIJŲ IR REIKŠMIŲ UŽDAVINIO SPRENDIMAS NAUDOJANT HIPERBOLINIO TANGENTO „TILTO“ FUNKCIJAS

9.1 PROGRAMOS APRAŠYMAS

Naudodamiesi matematiniu kompiuterio paketu Mathcad sudarėme originalias skaitinio sprendimo programas. Žemiau aprašyta mūsų sudaryta programa, sprendžianti Šriodingerio lygtį pirmuoju aprašytu algoritmu. Visų sudarytų programos komandos aptrašai:

suo(x, g, p, h) –„tilto“ funkcija;

suo1(x, g, p, h) – pirmoji išvestinė „tilto“ funkcios;

suo2(x, g, p, h) – antroji išvestinė „tilto“ funkcios;

X1 – kairysis intervalo kraštas;

X2 – dešinysis intervalo kraštas;

Xv – intervalo vidurio taškas;

Xs – intervalo plotis;

g – potencinės energijos parametras;

u(x) - potencinė energija;

Xs – tai x reikšmė nuo kurios programa Minimize pradeda ieškoti potencinės energijos minimumo;

u3 – minimumo gylis;

x3 – minimumo koordinatė;

N – aproksimavimo polinomų laipsnis;

N1 – polinomo koeficentų skaičius;

M – polinomo laipsnis;

m – laipsnio indeksai;

n – laipsnio indeksai;

L1 – aproksimavimo zonų skaičius;

L – paskutinis zonos skaičius;

T – aproksimavimo taškų skaičius;

t – taškų indeksai;

x_t – aproksimavimo taškų koordinatės;

p – „tilto“ pusplotis;

h – „tilto“ nuožulnumas;

$\boldsymbol{X_l}$ – zonų centrų koordinatės;

y0(m,l,x) – aproksimavimo funkcija;

y1(m,l,x) – aproksimavimo funkcijos pirmoji išvestinė;

y2(m,l,x) – aproksimavimo funkcijos antroji išvestinė;

$\boldsymbol{a0_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ - algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų diferencialinę lygtį, matricos pirmoji dalis;

$\boldsymbol{a1_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ - algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų diferencialinę lygtį, matricos antroji dalis;

$\boldsymbol{a2_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ - algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų diferencialinę lygtį, matricos trečioji dalis;

$\boldsymbol{b0_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ – algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų kraštines sąlygas, matricos pirmoji dalis;

$\boldsymbol{b05_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ – algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų kraštines sąlygas, matricos antroji dalis;

$\boldsymbol{b1_{m+1\cdot N1,n+j\cdot N1}}$ – algebrinių lygčių, reikalaujančių, kad patenkintų kraštines sąlygas, matricos trečioji dalis;

A(E) – jungtinė kairiosios dalies matrica;

E – energijos, kurioms skaičiuojami A matricos determinantai, reikšmės;

$\boldsymbol{v_k}$ – kokiems taškams paskaičiuojama determinantai;

$\boldsymbol{q'_j}$ – fiksuojame tą energijos E reikšmę, kuriai abi kiamyninės funkcijų reikšmės yra didesnės;

q – užrašome eilės tvarka;

R – skaičiuojame minimumų kiekį;

d – minimumo patikslinimo intervalas;

ti – diferencialinės lygties sprendimo paklaida;

d1(x,y,E) – diferencialinių lygčių dešiniosios pusės;

r – sunumeruojame;

D(x,z) – diferencialinių lygčių dešiniosios pusės;

Eσ – jungiame eilės stulpelį, energijos E tikrinių reikšmių stulpelį ir paklaidų stulpelį į trijų stulpelių matricą;

N' – taškų skaičius;

σ – paklaida dešiniajame krašte;

9.2 SPRENDIMO PROGRAMA MATHCAD`U

$$suo(x,g,p,h) := \frac{1}{2}\cdot\left(\tanh\left(\frac{x-g+p}{h}\right) - \tanh\left(\frac{x-g-p}{h}\right)\right)$$

$$suo1(x,g,p,h) := \frac{1}{2\cdot h}\cdot\left(-\tanh\left(\frac{x-g+p}{h}\right)^2 + \tanh\left(\frac{x-g-p}{h}\right)^2\right)$$

$$suo2(x,g,p,h) := \frac{1}{h\cdot h}\cdot\left(-\tanh\left(\frac{x-g+p}{h}\right) + \tanh\left(\frac{x-g-p}{h}\right) + \tanh\left(\frac{x-g+p}{h}\right)^3 - \tanh\left(\frac{x-g-p}{h}\right)^3\right)$$

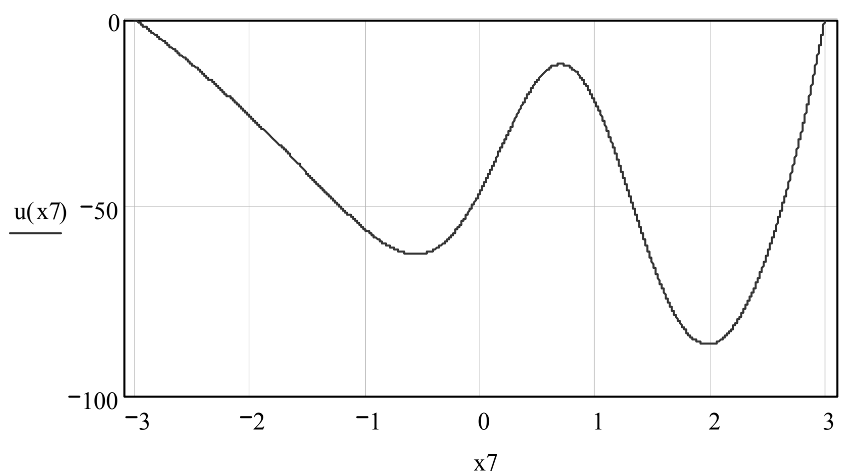
$X1 := -3.($ $\quad X2 := 3.($ $\quad Xv := 0.5\cdot(X1 + X2)$ $\quad Xs := X2 - X1$

$g1 := -9($ $\quad g2 := 12($

$$u(x) := \left[g1\cdot\left[1-\left(\frac{x}{X1}\right)^2\right]\cdot e^{\frac{x}{X2}} + g2\cdot e^{-(x-1)^2}\cdot\cos\left(\frac{\pi\cdot x}{2X2}\right)^2\right]\cdot\left(x^2 \le X2^2\right)$$

Potencinės energijos su lokaliniais minimumias grafikas:

$x7 := X1, X1 + 0.002 .. X2$



$x3 := 2$ $\quad x3 := Minimize(u, x3)$ $\quad u3 := |u(x3)|$ $\quad x3 = 1.983$ $\quad u3 = 86.379$

$N := 3$ $\quad N1 := N + 1$ $\quad M := N$ $\quad m := 0.. M$ $\quad n := 0.. N$

$L1 := 12$ $\quad L := L1 - 1$ $\quad l := 0.. L$ $\quad j := 0.. L$ $\quad T := N1\cdot L1 + 5($ $\quad t := 0.. T$ $\quad x_t := X1 + \frac{Xs\cdot t}{T}$

$p := \frac{Xs}{1.9L}$ $\quad h := 1.1p$ $\quad X_l := Xv + p\cdot(2l - L)$

$$y0(m,l,x) := suo\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^m$$

$$y1(m,l,x) := suo1\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^m + suo\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\frac{m}{p}\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^{|m-1|}$$

$$y2(m,l,x) := suo2\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^{m} + 2\cdot suo1\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\frac{m}{p}\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^{|m-1|} + suo\left(x, X_l, p, h\right)\cdot\frac{m\cdot(m-1)}{p\cdot p}\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^{|m-2|}$$

$p = 0.287$

$$a0_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left[y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y2\left(n,j,x_t\right) - \left(y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right) + y2\left(n,j,x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\right)\cdot u\left(x_t\right) + u\left(x_t\right)^2\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right]$$

$$a1_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left(y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right) + y2\left(n,j,x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right) - 2\cdot u\left(x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right)$$

$Qa = 24.936$

$$a2_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left(y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right) \qquad Qa := \frac{u3}{\sqrt{L1}} \qquad Qb := L$$

$Qb = 11$

$$b0_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y1(m,l,X1)\cdot y1(n,j,X1) + y1(m,l,X2)\cdot y1(n,j,X2))\cdot Qb$$

$$b05_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y1(m,l,X2)\cdot y0(n,j,X2) + y0(m,l,X2)\cdot y1(n,j,X2) - y1(m,l,X1)\cdot y0(n,j,X1) - y0(m,l,X1)\cdot y1(n,j,X1))\cdot Qb$$

$$b1_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y0(m,l,X1)\cdot y0(n,j,X1) + y0(m,l,X2)\cdot y0(n,j,X2))\cdot Qb$$

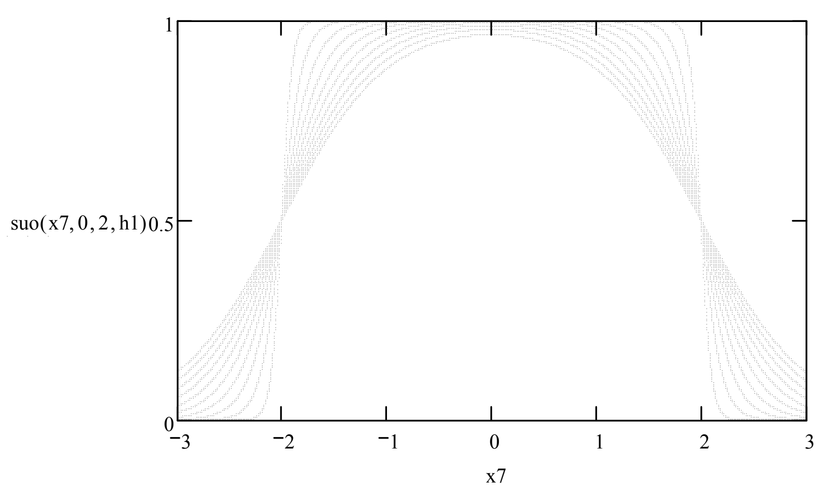
$$A(E) := \left[a0 + b0 + \sqrt{E}\cdot b05 + E\cdot(b1 - a1) + E^2\cdot a2\right]\cdot Qa\cdot\left[1 + 2\cdot\left(\frac{E}{u3}\right)^2\right]^{-1.0}$$

$A1_{0, n+j\cdot N1} := 0 \qquad A1_{0,0} := 1 \qquad B_{m+l\cdot N1} := 0 \qquad B1_0 := 1$

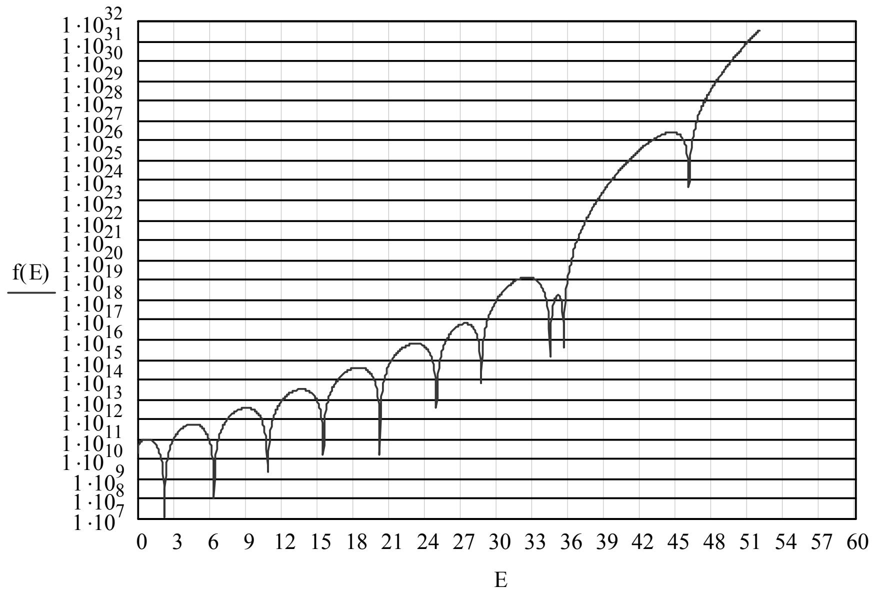
$K := 1000 \qquad k := 0..K \qquad h := \frac{u3}{K} \qquad E := 0, h..u3 \qquad f(E) := |A(E)| \qquad F(E) := \sqrt[15]{f(E)}$

„Tilto“ funkcijos su įvairiais nuožulnumais h grafikai:

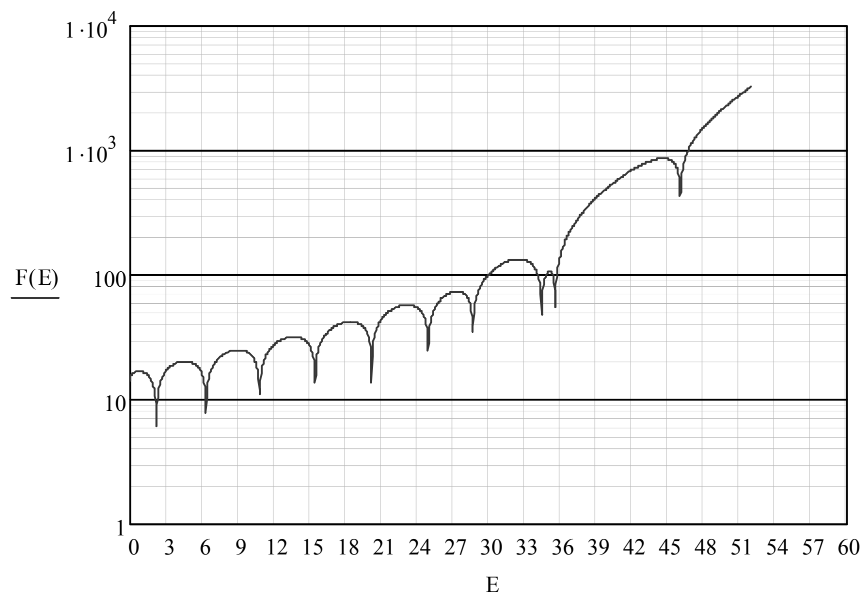
$h1 := 0.1, 0.2..1$



Determinantų logaritminis grafikas:



Redukuotas determinanto grafikas:



Minimumų pirminės paieškos programa:

$v_k := \frac{u3}{K} k \qquad V_k := F\left(v_k\right) \qquad j := 1 .. K - 1 \qquad q'_j := \left(V_{j-1} > V_j\right)\cdot\left(V_{j+1} > V_j\right)\cdot v_j \qquad q := -\mathrm{sort}(-q')$

$R := \left\lceil \sum_{j=1}^{K-1} \left(q_j > 0\right) \right\rceil \qquad r := 0 .. R \qquad E'_r := q_r$

Patiksliname ir konkrečius sunumeruojame minimumus, taip pat apskaičiuojame dešiniosios kraštinės sąlygos patenkinimo paklaidą:

$$ti := 10^{-16} \qquad d1(x, y, E) := \begin{bmatrix} y_1 \\ (E + u(x)) \cdot y_0 \end{bmatrix}$$

Minimumų tikslinimo programos:

$$ru(E) := \left| \begin{array}{l} u0 \leftarrow \begin{pmatrix} \dfrac{e^{-E}}{\sqrt{E}} \\ e^{-E} \end{pmatrix} \\ D(x,y) \leftarrow d(x,y,E) \\ u \leftarrow bulstoer(u0, X1, X2, ti, D, N, ti) \\ q \leftarrow \dfrac{u_{rows(u)-1,2}}{\sqrt{E}} + u_{rows(u)-1,1} \\ q \end{array} \right.$$

Tikrinės reikšmės:

E' =

	0
0	76.704778
1	57.787721
2	55.973757
3	43.967041
4	39.820836
5	33.342392
6	24.013433
7	23.14964
8	15.634645
9	10.106373
10	6.737582
11	1.468447

$$Ep'''_r := root\left(ru(E), E, E'_r - h, E'_r + h\right) \qquad h' := 10^{-2} \cdot h$$

$$Ep''_r := root\left(ru(E), E, Ep'''_r - h', Ep'''_r + h'\right) \qquad h1 := 10^{-4} \cdot h'$$

$$Ep'_r := root\left(ru(E), E, Ep''_r - h1, Ep''_r + h1\right) \qquad h2 := 10^{-4} \cdot h1$$

$$Ep_r := -root\left(ru(E), E, Ep'_r - h2, Ep'_r + h2\right) \qquad E1 := sort(Ep)$$

$$E2 := -E1_9 \qquad z0 := \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{E2} \end{pmatrix} \qquad D(x, z) := \begin{bmatrix} z_1 \\ (u(x) + E2) \cdot z_0 \end{bmatrix}$$

Energijos E reikšmės:

E1 =

	0
0	-76.697334
1	-57.760573
2	-55.986218
3	-43.977286
4	-39.784499
5	-33.329982
6	-24.015675
7	-23.140782
8	-15.608928
9	-10.148992
10	-6.771386
11	-1.471052

ru(E) komanda leidžia apskaičiuoti mūsų suformuotą paklaidą:

$$N' := 100(\qquad n' := 0.. N'$$

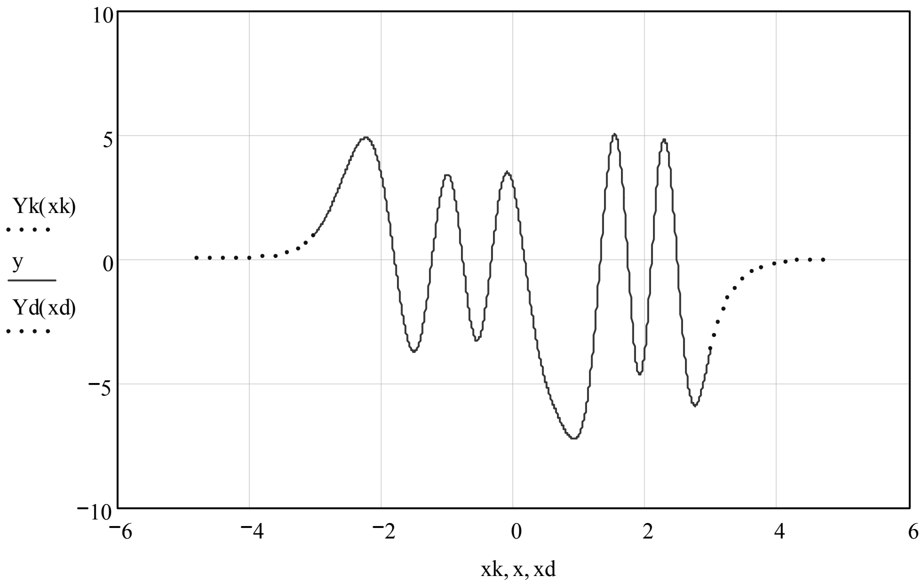
Lygties sprendimo Rungės ir Kutos metodu programa su fiksuotu žingsniu:

$$Z := rkfixed(z0, X1, X2, N', D)$$

$$x_{n'} := Z_{n',0} \qquad y_{n'} := Z_{n',1} \qquad y'_{n'} := Z_{n',2} \qquad \sigma := \frac{y'_{N'}}{y_{N'}} + \sqrt{E2}$$

$$E_{r,n'} := E1_r \cdot \left(-u\left(x_{n'}\right) > -E1_r\right) \qquad \sigma = 9.072 \times 10^{-6}$$

Palyginimo grafikas: ir aproksimavimo „tilto“ funkcijomis, ir Rungės ir Kutos metodu banginės funkcijos y(x) sprendimo grafikai „persidengia“:



Tikrinių reikšmių (2 stulpelis) ir jų nustatymo paklaidų (3 stulpelis) lentelė, kai aproksimuojama L=13 „tilto“ funkcijų:

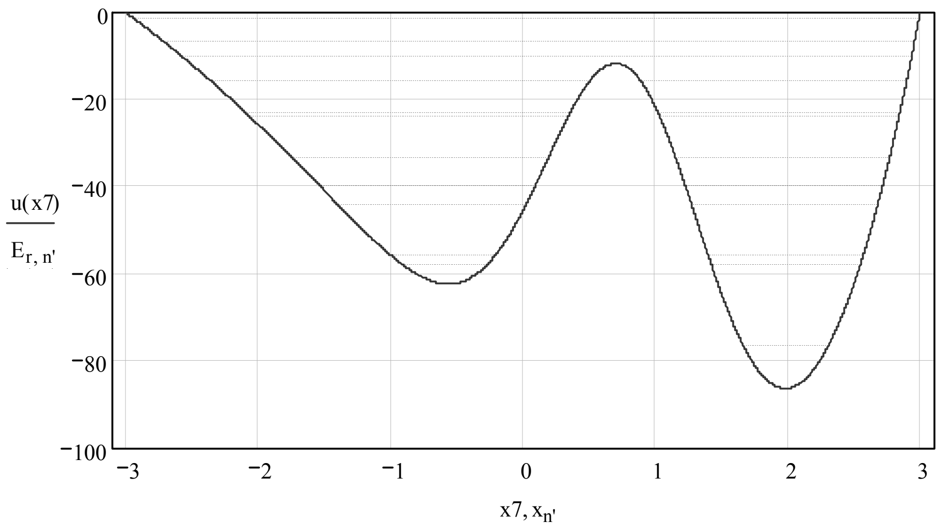
L1=13

$$
\begin{pmatrix}
0 & 46.12 & -3.311\times 10^{-3} \\
1 & 35.642 & -8.046\times 10^{-5} \\
2 & 34.52 & -2.754\times 10^{-3} \\
3 & 28.758 & -5.991\times 10^{-7} \\
4 & 25.017 & -2.688\times 10^{-4} \\
5 & 20.274 & -1.826\times 10^{-4} \\
6 & 15.558 & -6.597\times 10^{-4} \\
7 & 10.944 & -4.828\times 10^{-4} \\
8 & 6.455 & -1.383\times 10^{-5} \\
9 & 2.294 & 1.266\times 10^{-4}
\end{pmatrix}
$$

$$xk := X1 - 0.3Xs,\ X1 - 0.3Xs + 0.01 .. X1 \qquad Yd(xd) := y_{N'} \cdot e^{-(xd - X2)\cdot\sqrt{E2}}$$

$$xd := X2,\ X2 + 0.01 .. X2 + 0.3Xs \qquad Yk(xk) := 1 \cdot e^{(xk - X1)\cdot\sqrt{E2}}$$

Potencinės energijos u(x) grafikas: horizontalios linijos – tikrinės energijos E reikšmės:



Analogiškos (kitos) programos yra prieduose.

10. MATHCAD`O MATEMATINIŲ PROGRAMŲ PAKETAS

MATHCAD`as leidžia atlikti daug įvairių mokslinių, inžinierinių skaičiavimų. Tai puikus matematinis redaktorius. Su šia programa galime skaičiuoti paprasčiausius aritmetinius veiksmus arba sudėtingiausius procesus, naudojantis įvairiais skaičiavimo metodais. Tai programa, kuri yra panaši į skaičiuoklę. MATHCAD`o galimybės apima įvairias matematikos sritis: kombinatoriką, tikimybių teoriją, algebrą, geometriją ir t.t. Šia programa gali naudotis ne tik studentai ar dėstytojai, bet ir inžinieriai, įvairūs technikos specialistai. Programa labai paprasta naudotis, turi labai didelę matematinių metodų biblioteką taip pat nesunkiai galima pavaizdavimo rezultatus grafiškai ar animacija. Todėl ši programa yra plačiai žinoma tarp studentų ir dėstytojų, mokslo srityje.

Matematinis programų paketas MATHCAD tinka tiek mokymuisi, tiek moksliniam darbui atlikti. Trūkumas yra tai, kad simbolinių skaičiavimų ir programavimo galimybės yra ribotos, nes yra sunku kurti savo programas ir funkcijas.

MATHCAD'o pagrindinės funkcijos yra šios: skaičiavimo su realaus tipo bei kompleksiniais kintamaisiais, su vektoriais, skaliarais ir matricomis taip pat specialiųjų, elementariųjų, vartotojo ir statistinių funkcijų panaudojimas, lygčių sprendimas, sumų ir integralų apskaičiavimas, simboliniai skaičiavimai, grafikų braižymas, programavimas.

Šia matematine programa galima apskaičiuoti įvairias kombinatorines išraiškas, t.y.:faktorialą, derinių skaičių, integralus, eilučių sumų skaičių, nubraižyti 7 tipų grafikus ir t.t. Taip pat su MATHCAD'u galima atlikti statistinę duomenų analizę. Galima įvesti bei išvesti skaitinius it tekstinius duomenis bei dirbti su kintamųjų išraiškomis. Galima naudoti MATHCAD`o įrankių juostas Calculus, Calculator, Graph, Math, Matrix, Symbolics ir kt. Šios programos dėka galima apibrėžti ir įvesti įvairiausias funkcijas: trigonometrines, hiperbolines, atvirkštines trigonometrines, atvirkštines hiperbolines, rodyklines, logaritmines. Be elementariųjų ir specialiųjų funkcijų dar yra ir vartotojo funkcijos. Tokios funkcijos apibrėžiamos rašant funkcijos identifikatorių ir lokalinius bei globalinius kintamuosius. Vartotojo funkcijos lokaliniai kintamieji aprašomi specialiosios funkcijos aprašymo viduje, o globaliniai – išorėje. Kiekviena funkcija turi savo identifikatorių, pvz:

$$y := \cos(x).$$

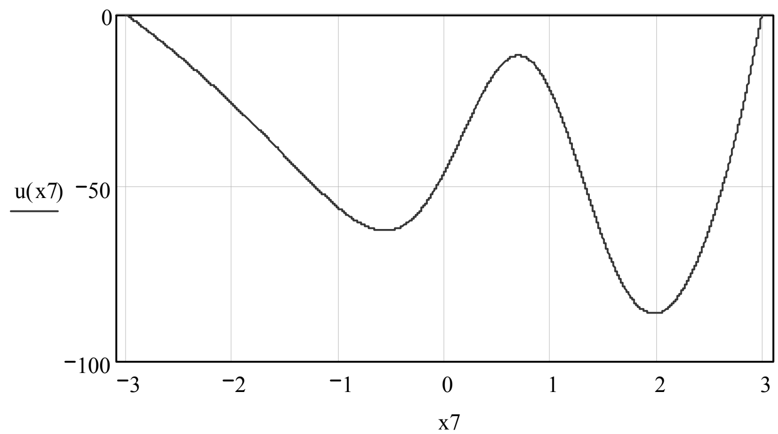
11. METODŲ EFEKTYVUMO PALYGINIMAS

Rudukuotos Šriodingerio lygties sprendinio ieškojome šiais būdais:

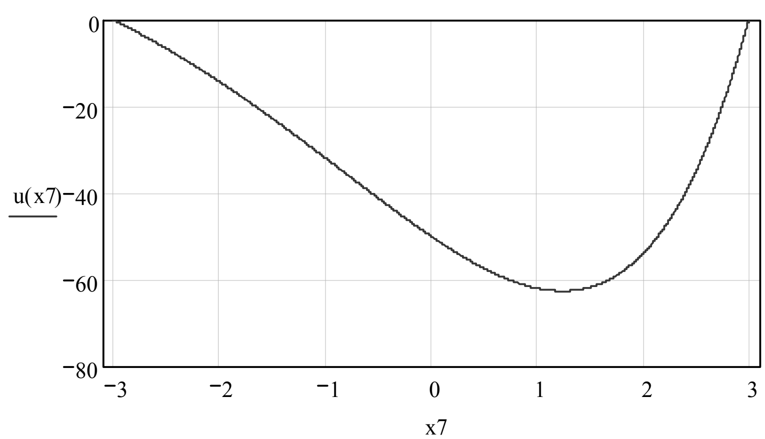
1) hiperbolinio tangento „tiltų“ metodu,
2) trigonometrinių „tiltų“ metodu,
3) „šaudymo“ metodu.

Gautus rezultatus, kurie buvo tiksliausi, tai buvo sprendžiant hiperbolinio tangento „tiltų“ metodu. Gautus sprendinius patikslinome Rungės ir Kutos metodu.

Hiperbolinio tangento „tiltų“ metodu mes galėjome Šriodingerio lygtį spręsti su gana sudėtingomis potencialinėmis duobėmis:



O trigonometrinių „tiltų“ metodu, ar „šaudymo“ metodu spręsdami mes turėjome rinktis kuo paprastesnes Šriodingerio lygtis su ne tokiom painiom potencialinėm duobėm:



Hiperbolinio tangento „tiltų“ metodu spręsdami gavome tokias tikrines E reikšmes:

E' =

	0
0	76.704778
1	57.787721
2	55.973757
3	43.967041
4	39.820836
5	33.342392
6	24.013433
7	23.14964
8	15.634645
9	10.106373
10	6.737582
11	1.468447

O paklaidos yra 10^{-6} eilės ($\sigma = 9{,}072 \times 10^{-6}$).

Trigonometrinių „tiltų“ metodu gavome tokias tikrines E reikšmes:

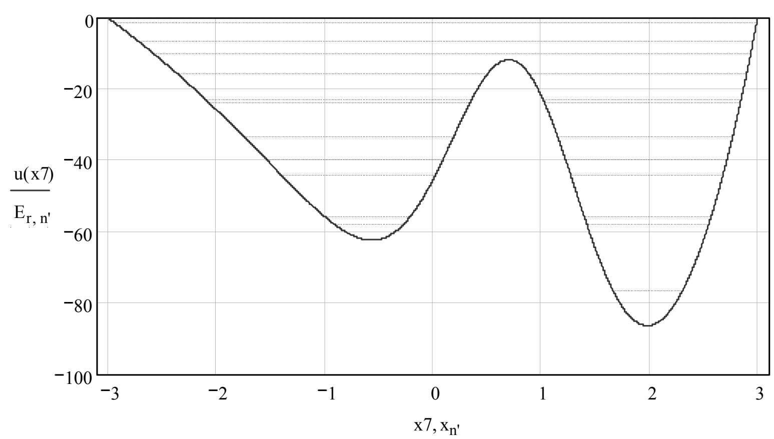
E' =

	0
0	59.19935
1	52.524146
2	46.005636
3	39.800516
4	33.846108
5	28.111073
6	22.219343
7	16.797698
8	11.689443
9	6.612527
10	2.068373

Ir paklaida yra jau Šiek tiek didesnė ($\sigma = 1{,}416 \times 10^{-5}$).

Tad jei norime rasti labai tikslias reikšmes, reikia spręsti hiperbolinio tangento „tiltų“ metodu.

Sudėtingesnės duobės potencinės energijos ir sprendinių, t.y., tikrinių reikšmių grafikas:



IŠVADOS

Redukuotą Šriodingerio lygtį

$$y'' - [E + u(x)] \cdot y = 0$$

mes išbandėme spręsdami šiais sprendimo metodais:

1) aproksimavimui naudojome hiperbolinio tangento „tiltų“ funkcijas,

2) aproksimavimui naudojome trigonometrinių „tiltų“ funkcijas,

3) „šaudymo“ metodu.

Mes nustatėme, kad tiksliausios reikšmės yra gautos su „tiltų“ funkcijomis (hiperbolinio tangento „tilto“ funkcijų pagalba). Tai detaliau aprašėme skyrelyje „Metodų efektyvumo palyginimas“. Tiksliausios ir plačiausios galimybės yra skaičiuojant „tilto“ funkcijų pagalba, bet tai užtrunka daug laiko. „Tilto“ funkciją mes pritaikėme spręsdami ir labai sudėtingoms „tilto“ funkcijų duobėms, kurioms sprendžiant kitais metodais redukuotą Šriodingerio lygtį, sprendimas būna komplikuotas. Pavyzdžiui, kai „duobė“ turi ne viena lokalinį minimumą, tai kitais metodais negalime net išspręsti. O sprendžiant net labai sudėtingas duobes su „tilto“ funkcijomis mes gauname pakankamai tikslias energijos reikšmes. Toks uždavinys yra labai svarbus fizikams, nes jiems yra labai svarbu žinoti ir patį sprendinį banginės funkcijos iš kurio yra nusakomos visos fizikinės sąvybės, pavyzdžiui: dalelės būvimo vietos tikimybę, kuri yra lygi banginės funkcijos absoliutaus dydžio kvadratui.

LITERATŪROS SĄRAŠAS

1. PLUKAS, K. *Skaitiniai metodai ir algoritmai.* Kaunas, 2001.
2. GOLOKVOSČIUS, P. *Tiesinės ir kvazitiesinės pirmosios eilės dalinių išvestinių diferencialinės lygtys.* Vilnius, 1996.
3. КИРЪЯНОВБ, Д. *Mathcad*, Санкт-Петербург, 2003.
4. BANZAITIS, A. *Kvantinė mechanika*, Vilnius 1980.
5. PLUKIENĖ, D. *Taikomoji matematika*. Kaunas, 2004. 218p.
6. MIKUCKYTE, E. *Šriodingerio lygties tikrinių reikšmių sprendimas mažiausių kvadratų metodu,* , (bakalauro darbas), Šiauliai, 2009.

Schrodinger equation of "bridges" and "shooting" methods

SUMMARY

Try some Schrodinger equation with finite energy Potential energy eigenvalue pit detection methods numerical methods.

Reduced Schrodinger equation (2) Potential energy of a particular pit exhaustively we deal with the range of three ways:

1. Hyperbolic tangent "bridge" method,
2. Trigonometric "bridge" function method,
3. Standard "shooting" method.

Essence:

Looking for the solution of differential equation as:

$$z(x) = \sum_{l=0}^{L} \sum_{n=0}^{N} C_{l,n} \left(\frac{x - X_l}{p} \right)^n \cdot f(x) \left(\frac{x - X_l - p}{h} \right).$$

By requesting to meet and differential equations and side`s conditions. The challenge brought together in a homogeneous system of algebraic equations and the requirement that the coefficients of the undefined parameters to set up a matrix of zero obtained verify the energy E of interest. In addition, the last stage of the numerical values specify the integration of the differential equation and the Runge Kutta variable step method.

PRIEDAI

Tikrinių funkcijų ir reikšmių uždavinio sprendimas naudojant trigonometrines „tiltų“ funkcijas:

$$\mathrm{suo}(x,g,p) := \cos\left(\pi\cdot\frac{x-g}{2p}\right)^2\cdot(-p < x-g \le p)$$

$$\mathrm{suo1}(x,g,p) := \frac{-\pi}{2p}\cdot\sin\left(\pi\cdot\frac{x-g}{p}\right)\cdot(-p < x-g \le p)$$

$$\mathrm{suo2}(x,g,p) := \frac{-\pi^2}{2p^2}\cdot\cos\left(\pi\cdot\frac{x-g}{p}\right)\cdot(-p < x-g \le p)$$

$$X1 := -3.0 \qquad X2 := 3.0 \qquad Xv := 0.5\cdot(X1 + X2) \qquad Xs := X2 - X1$$

$$g1 := -50 \qquad g2 := 120 \qquad u(x) := \left[g1\cdot\left[1-\left(\frac{x}{X1}\right)^2\right]\cdot e^{\frac{x}{X2}}\right]\cdot\left(x^2 \le X2^2\right)$$

$$x3 := 2 \qquad x3 := \mathrm{Minimize}(u, x3) \qquad u3 := |u(x3)| \qquad x3 = 1.243 \qquad u3 = 62.678$$

$$N := 3 \qquad N1 := N + 1 \qquad M := N \qquad m := 0..M \qquad n := 0..N$$

$$L1 := 10 \qquad L := L1 - 1 \qquad l := 0..L \qquad j := 0..L \qquad T := N1\cdot L1 + 50 \qquad t := 0..T \qquad x_t := X1 + \frac{Xs\cdot t}{T}$$

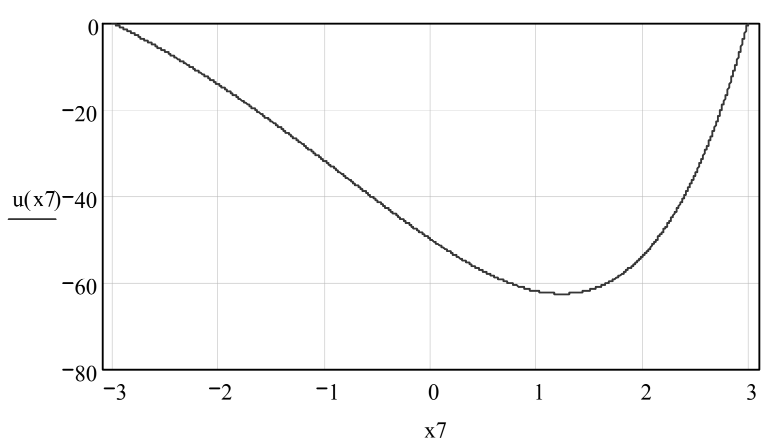
$$p := \frac{Xs}{0.95L} \qquad X_l := Xv + p\cdot\left(l - \frac{L}{2}\right)$$

$$y0(m,l,x) := \mathrm{suo}\left(x, X_l, p\right)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^m$$

$$y1(m,l,x) := \mathrm{suo1}\left(x, X_l, p\right)\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^m + \mathrm{suo}\left(x, X_l, p\right)\cdot\frac{m}{p}\cdot\left(\frac{x - X_l}{p}\right)^{|m-1|}$$

Potencinės energijos su lokaliniais minimumiais grafikas:

$$x7 := X1, X1 + 0.002..X2$$



X =

	0
0	-3.158
1	-2.456
2	-1.754
3	-1.053
4	-0.351
5	0.351
6	1.053
7	1.754
8	2.456
9	3.158

$$y2(m,l,x) := suo2\left(x, X_l, p\right)\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^m + 2\cdot suo1\left(x, X_l, p\right)\cdot\frac{m}{p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{|m-1|} + suo\left(x, X_l, p\right)\cdot\frac{m\cdot(m-1)}{p\cdot p}\cdot\left(\frac{x-X_l}{p}\right)^{|m-2|}$$

$$a0_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left[y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y2\left(n,j,x_t\right) - \left(y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right) + y2\left(n,j,x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\right)\cdot u\left(x_t\right) + u\left(x_t\right)^2\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right]$$

$$a1_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left(y2\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right) + y2\left(n,j,x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right) - 2\cdot u\left(x_t\right)\cdot y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right)$$

$$a2_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := \frac{1}{T}\cdot\sum_{t=0}^{T}\left(y0\left(m,l,x_t\right)\cdot y0\left(n,j,x_t\right)\right) \qquad Qa := \frac{N}{\sqrt{L1}} \qquad Qb := L$$

$$b0_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y1(m,l,X1)\cdot y1(n,j,X1) + y1(m,l,X2)\cdot y1(n,j,X2))\cdot Qb$$

$$b05_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y1(m,l,X2)\cdot y0(n,j,X2) + y0(m,l,X2)\cdot y1(n,j,X2) - y1(m,l,X1)\cdot y0(n,j,X1) - y0(m,l,X1)\cdot y1(n,j,X1))\cdot Qb$$

$$b1_{m+l\cdot N1, n+j\cdot N1} := (y0(m,l,X1)\cdot y0(n,j,X1) + y0(m,l,X2)\cdot y0(n,j,X2))\cdot Qb$$

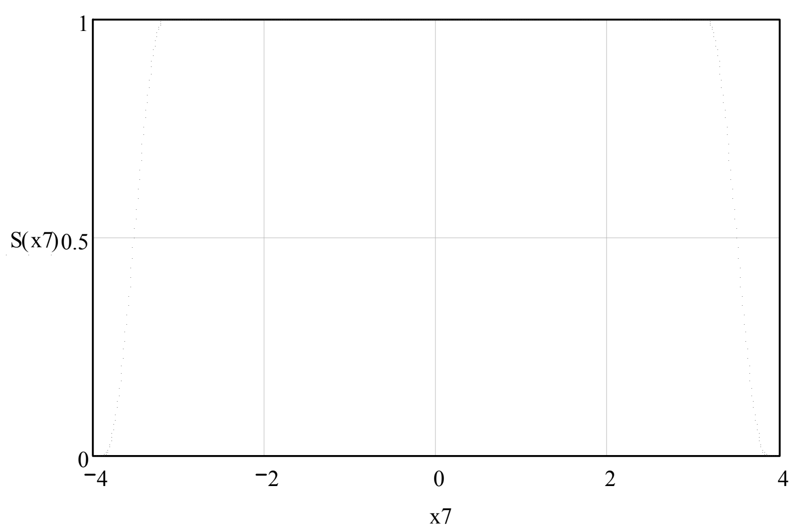
$$A(E) := \left[a0 + b0 + \sqrt{E}\cdot b05 + E\cdot(b1 - a1) + E^2\cdot a2\right]\cdot Qa\cdot\left[1 + 1.5\cdot\left(\frac{E}{u3}\right)^2\right]^{-1.0}$$

$p = 0.702$

$$S(x) := \sum_{l=0}^{L} suo\left(x, X_l, p\right)$$

„Tilto“ funkcijos su įvairiais nuožulnumais h grafikas:

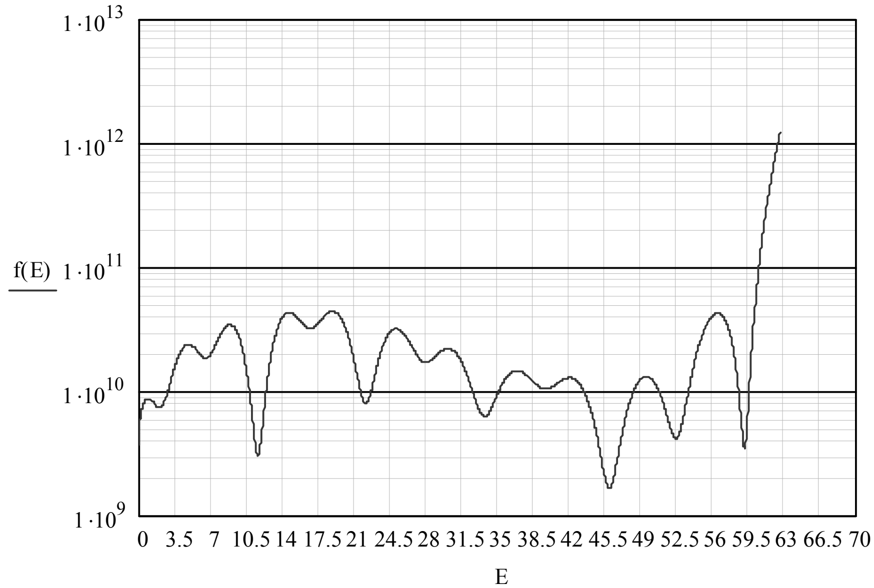
$x7 := -4, -3.99 .. 4$



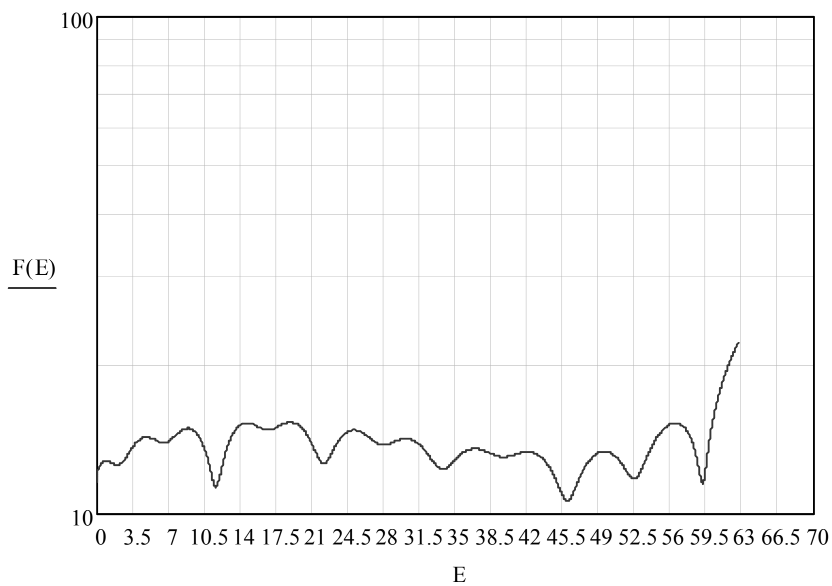
$A1_{0,n+j\cdot N1} := 0$ $A1_{0,0} := 1$ $B_{m+l\cdot N1} := 0$ $B1_0 := 1$

$K := 2000$ $k := 0..K$ $h := \frac{u3}{K}$ $E := 0, h..u3$ $f(E) := |A(E)|$ $F(E) := \sqrt[9]{f(E)}$

Determinantų logaritminis grafikas:



Redukuotas determinanto grafikas:



$v_k := \frac{u3}{K}k$ $\quad V_k := f(v_k)$ $\quad j := 1..K-1$ $\quad q'_j := (V_{j-1} > V_j)\cdot(V_{j+1} > V_j)\cdot v_j$ $\quad q := -\mathrm{sort}(-q')$

$R := \left[\sum_{j=1}^{K-1} (q_j > 0)\right]$ $\quad r := 0..R$ $\quad E'_r := q_r$ $\quad ti := 10^{-15}$ $\quad d(x,y,E) := \begin{bmatrix} y_1 \\ (E + u(x))\cdot y_0 \end{bmatrix}$

$$ru(E) := \left[\begin{array}{l} u0 \leftarrow \begin{pmatrix} \frac{e^{-E}}{\sqrt{E}} \\ e^{-E} \end{pmatrix} \\ D(x,y) \leftarrow d(x,y,E) \\ u \leftarrow \mathrm{bulstoer}(u0, X1, X2, ti, D, N, ti) \\ q \leftarrow \frac{u_{\mathrm{rows}(u)-1,2}}{\sqrt{E}} + u_{\mathrm{rows}(u)-1,1} \\ q \end{array} \right]$$

$Nr := \mathrm{rows}(E')$

$Nr = 11$

$h0 := \frac{u3}{9Nr}$

$h0 = 0.633$

E' =

	0
0	59.19935
1	52.524146
2	46.005636
3	39.800516
4	33.846108
5	28.111073
6	22.219343
7	16.797698
8	11.689443
9	6.612527
10	2.068373

$Ep'''_r := \mathrm{root}(ru(E), E, E'_r - h0, E'_r + h0)$ $\quad h' := 10^{-2}\cdot h0$

$Ep''_r := \mathrm{root}(ru(E), E, Ep'''_r - h', Ep'''_r + h')$ $\quad h1 := 10^{-4}\cdot h'$

$Ep'_r := \mathrm{root}(ru(E), E, Ep''_r - h1, Ep''_r + h1)$ $\quad h2 := 10^{-4}\cdot h1$

$Ep_r := -\mathrm{root}(ru(E), E, Ep'_r - h2, Ep'_r + h2)$ $\quad E1 := \mathrm{sort}(Ep)$

$E2 := -E1_7$ $\quad z0 := \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{E2} \end{pmatrix}$ $\quad D(x,z) := \begin{bmatrix} z_1 \\ (u(x) + E2)\cdot z_0 \end{bmatrix}$

$N' := 100($ $\quad n' := 0..N$ $\quad Z := \mathrm{rkfixed}(z0, X1, X2, N', D)$

$x_{n'} := Z_{n',0}$ $\quad y_{n'} := Z_{n',1}$ $\quad y'_{n'} := Z_{n',2}$ $\quad \sigma := \frac{y'_{N'}}{y_{N'}} + \sqrt{E2}$

$E_{r,n'} := E1_r\cdot(-u(x_{n'}) > -E1_r)$ $\quad \sigma = 1.416\times 10^{-5}$

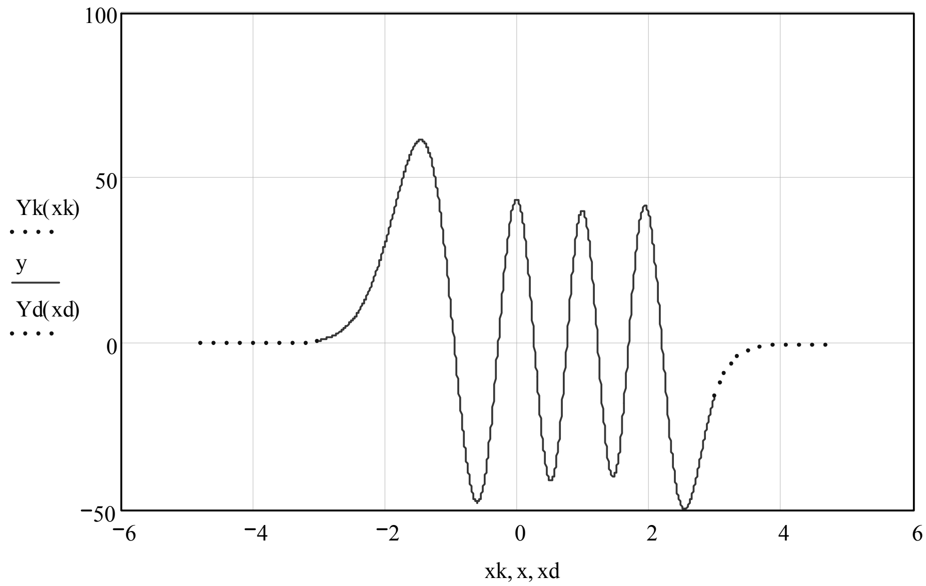
$xk := X1 - 0.3Xs, X1 - 0.3Xs + 0.01..X1$ $\quad xd := X2, X2 + 0.01..X2 + 0.3Xs$

$Yk(xk) := e^{(xk-X1)\cdot\sqrt{E2}}$ $\quad Yd(xd) := y_{N'}\cdot e^{-(xd-X2)\cdot\sqrt{E2}}$

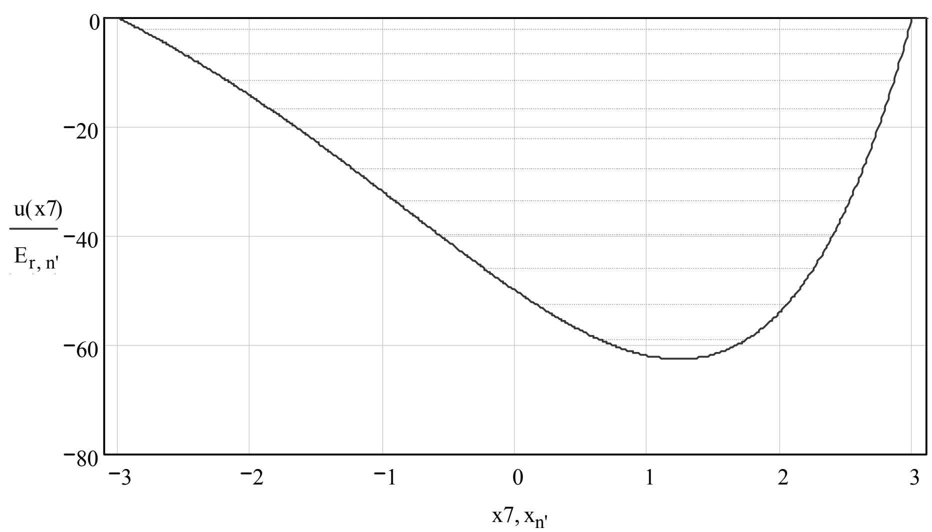
E1 =

	0
0	-59.256719
1	-52.559665
2	-46.065002
3	-39.776885
4	-33.700269
5	-27.841416
6	-22.208664
7	-16.813637
8	-11.673854
9	-6.824094
10	-2.397411

Palyginimo grafikas: ir aproksimavimo „tilto“ funkcijomis, ir Rungės ir Kutos metodu banginės funkcijos y(x) sprendimo grafikai „persidengia“:



Potencinės energijos u(x) grafikas: horizontalios linijos – tikrinės energijos E reikšmės:



Tikrinių funkcijų ir reikšmių uždavinio sprendimas naudojant „šaudymo“ metodą:

$x1 := -5 \qquad x2 := 6 \qquad xv := \frac{x1 + x2}{2} \qquad r := 4 \qquad R := x2 - x1 \qquad N := 9999 \qquad n := 0..N$

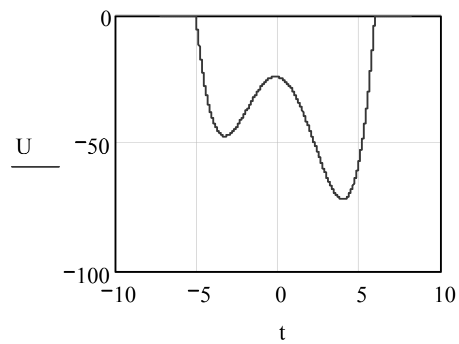
$g := 0.2 \qquad u(x) := g\cdot(x - x1)\cdot(x - x2)\left(x^2 + 4\right)\cdot(x > x1)\cdot(x < x2) \qquad t_n := xv + 0.7\cdot R\cdot\left(\frac{2n}{N} - 1\right)$

$d(x, y, E) := \begin{bmatrix} y_1 \\ (E + u(x))\cdot y_0 \end{bmatrix} \qquad ti := 10^{-15} \qquad U_n := u\left(t_n\right) \qquad Um := \left|\min(U)\right| \qquad w := \frac{\int_{x1}^{x2} \sqrt{\left|u(x)\right|}\,dx}{R}$

Sprendimo Rundės ir Kutos kintamu žingsniu programa:

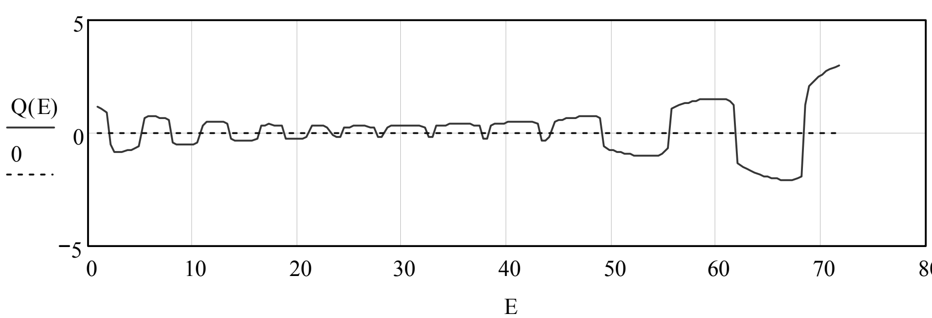
$$ru(E) := \left| \begin{array}{l} u0 \leftarrow \begin{pmatrix} \dfrac{e^{\frac{-E\cdot r}{w}}}{\sqrt{E}} \\ e^{\frac{-E\cdot r}{w}} \end{pmatrix} \\ D(x,y) \leftarrow d(x,y,E) \\ u \leftarrow bulstoer(u0, x1, x2, ti, D, N, ti) \\ q \leftarrow \dfrac{u_{rows(u)-1,2}}{\sqrt{E}} + u_{rows(u)-1,1} \\ q \end{array} \right.$$

Potencinė duobė ir tikrinės energijos E reikšmės:



$E0 := 1 \qquad h := 0.4 \qquad Eg := Um \qquad E := E0, E0 + h .. Eg \qquad q(E) := ru(E) \qquad Q(E) := \sqrt[9]{q(E)}$

Tikrinės reikšmės žvalgybos grafikas:



$K := \mathrm{floor}\left(\frac{Eg - E0}{h} - 1\right)$ $\quad k := 0..K \quad E'_k := E0 + h\cdot k \quad q'_k := Q\left(E'_k\right) \quad Eq := \mathrm{augment}(E', q')$

$k := 1..K \quad P := \sum_{k=1}^{K} \left(q'_{k-1}\cdot q'_k < 0\right) \quad z_0 := 0$

$K = 176$

$z_k := \left(q'_{k-1}\cdot q'_k < 0\right)\cdot E'_{k-1} + \Phi\left(q'_{k-1}\cdot q'_k\right)\cdot Un \quad h' := 10^{-2}\cdot h$

$z' := \mathrm{sort}(z) \quad Z' := \mathrm{submatrix}(z', 1, P, 0, 0) \quad p := 0..P-1$

$Ep'''_p := \mathrm{root}\left(q(E), E, Z'_p, Z'_p + h\right) \quad h1 := 10^{-4}\cdot h'$

$Ep''_p := \mathrm{root}\left(q(E), E, Ep'''_p - h', Ep'''_p + h'\right) \quad h2 := 10^{-4}\cdot h1$

$Ep'_p := \mathrm{root}\left(q(E), E, Ep''_p - h1, Ep''_p + h1\right) \quad P = 22$

$ep_p := -\mathrm{root}\left(q(E), E, Ep'_p - h2, Ep'_p + h2\right) \quad Ep := \mathrm{sort}(ep)$

$s := FRAME + 3 \quad E1 := Ep_s$

$$u0 := \begin{pmatrix} e^{\frac{E1\cdot r}{w}} \\ e^{\frac{E1\cdot r}{w}}\cdot\sqrt{|E1|} \end{pmatrix} \qquad D(x,y) := \begin{bmatrix} y_1 \\ (-E1 + u(x))\cdot y_0 \end{bmatrix}$$

$M := 1000(\quad m := 0..M \quad \phi := \mathrm{rkfixed}(u0, x1, x2, M, D)$

$$C := \frac{1}{M+1}\cdot\sum_{n=0}^{M} \left(\phi_{n,1}\right)^2 + \frac{\left(\phi_{0,1}\right)^2 + \left(\phi_{N,1}\right)^2}{2\sqrt{|E1|}} \qquad x_m := \phi_{m,0}$$

$$\Phi_m := \frac{\phi_{m,1}}{\sqrt{C}} \qquad \Phi'_n := \Phi_0\cdot e^{\sqrt{|E1|}\cdot(t_n - x1)}\cdot\left(t_n < x1\right) + \Phi_M\cdot e^{-\sqrt{|E1|}\cdot(t_n - x2)}\cdot\left(t_n > x2\right)$$

Tikrinės reikšmės ir paklaidos f-ija:

Ep =

	0
0	-68.595412
1	-61.895211
2	-55.41319
3	-49.17252
4	-44.202097
5	-43.2042
6	-38.492054
7	-37.552561
8	-33.153885
9	-32.288275
10	-28.312036
11	-27.55084
12	-24.447563
13	-23.39287
14	-21.050669
15	-18.884495
16	-16.385897
17	-13.753056
18	-10.979917
19	-8.099332
20	-5.145117
21	-2.19383

Eq =

	0	1
0	1	1.112
1	1.4	1.024
2	1.8	0.912
3	2.2	-0.552
4	2.6	-0.842
5	3	-0.866
6	3.4	-0.858
7	3.8	-0.832
8	4.2	-0.791
9	4.6	-0.731
10	5	-0.615
11	5.4	0.635
12	5.8	0.679
13	6.2	0.685
14	6.6	0.674
15	7	0.649
16	7.4	0.61
17	7.8	0.545
18	8.2	-0.471
19	8.6	-0.545
20	9	-0.559
21	9.4	-0.555

Normuotos banginės funkcijos grafikas: