

Математическое и компьютерное моделирование
Лабораторная работа № 3
УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ
ОСЦИЛЛЯТОР

1 Квантовая механика и уравнение Шредингера

Квантовая (волновая) механика — физическая теория, которая описывает природу в масштабе атомов и субатомных частиц. Субатомная частица — частица, намного меньшая, чем атом.

Квант — неделимая часть какой-либо величины в физике, например квант энергии.

Для описания состояния микрообъекта (например, электрона, протона, атома, молекулы) и вообще любой квантовой системы (например, кристалла) используется волновая функция ψ , которая является комплекснозначной функцией от координат и времени.

Описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции имеет вероятностный характер. Например, если задана зависимость $\psi(x, y, z, t)$ частицы от координат x, y, z и времени t , то квадрат модуля этой волновой функции $|\psi|^2 = |\psi(x, y, z, t)|^2$ определяет вероятность обнаружить частицу в момент t в точке с координатами (x, y, z) . Волновая функция находится из уравнения Шредингера.

Уравнение Шредингера, не зависящее от времени имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (1)$$

Здесь

- $\psi = \psi(x)$ — волновая функция частицы,
- x — координата (смещение),
- m — масса частицы,
- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $h = 6,62607015 \cdot 10^{34}$ кг·м²·с⁻¹ (Дж·с) — постоянная Планка — коэффициент, связывающий величину энергии кванта электромагнитного излучения с его частотой,
- $U(x)$ — внешняя по отношению к частице функция потенциальной энергии частицы в точке x ,
- E — полная энергия частицы.

Также уравнение (1) называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. Уравнение Шредингера — основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, описывающее динамику частиц.

Уравнение Шредингера — один из фундаментальных законов физики. «Фундаментальный закон» означает, что уравнение Шредингера не может быть выведено из более базовых принципов; его можно только вывести или предположить на основе экспериментальных данных. Его обоснованность подтверждается бесчисленными успешными количественными предсказаниями и объяснениями экспериментальных наблюдений.

2 Решение двухточечной краевой задачи для ЛОДУ второго порядка

2.1 Построение сетки и введение сеточных функций

Рассмотрим численное решение методом сеток краевой задачи

$$-u''(x) + q(x)u(x) = f(x), \quad a < x < b, \quad (2)$$

$$u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b. \quad (3)$$

Произведем дискретизацию области непрерывного изменения аргумента x , заменив отрезок $[a, b]$ сеткой ω^h — конечным набором точек $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$. Точки x_i , $i = 0, 1, \dots, N$ называются **узлами сетки** ω^h . Пусть шаг сетки $h = \frac{b-a}{N}$. Тогда $x_i - x_{i-1} = h$ для всех $i = 1, 2, \dots, N$. Заметим, что при $N \rightarrow \infty$ шаг $h \rightarrow 0$ (сетка измельчается).

Сетка ω^h естественным образом разбивается на два подмножества:

$$\omega^h = \mathbf{w}^h \cup \gamma^h.$$

Множество внутренних узлов \mathbf{w}^h состоит из тех узлов x_i , $1 \leq i \leq N-1$, которые лежат внутри интервала (a, b) . Множество граничных узлов γ^h состоит из двух узлов $x_0 = a$ и $x_N = b$, лежащих на границе отрезка $[a, b]$.

Далее будем вычислять решение краевой задачи не в произвольных точках отрезка $[a, b]$, а только в узлах сетки ω^h . Таким образом, искомой окажется не функция u , а сеточная функция u^h . Значения $u^h(x_i)$ этой функции в узлах x_i будем обозначать через u_i и рассматривать как приближения к значениям $u(x_i)$ решения задачи (2)–(3). Введем также сеточные функции q^h и f^h , принимающие в узлах сетки \mathbf{w}^h значения $q_i = q(x_i)$ и $f_i = f(x_i)$.

2.2 Построение разностной схемы

Производную $u''(x)$ можно аппроксимировать второй разностной производной:

$$u''(x) \approx \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} \quad (4)$$

с погрешностью $r_h(x) = u^{(4)}(\xi) \frac{h^2}{12}$, где $\xi \in [x - h, x + h]$. Действительно, по формуле Тейлора

$$\begin{aligned} u(x \pm h) &= u(x) \pm u'(x)h + \frac{u''(x)}{2}h^2 \pm \frac{u^{(3)}(x)}{6}h^3 + \frac{u^{(4)}(\xi_{\pm})}{24}h^4, \\ r_h(x) &= u''(x) - \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} = \\ &= u''(x) - \frac{1}{h^2} \left[u(x) - u'(x)h + \frac{u''(x)}{2}h^2 - \frac{u^{(3)}(x)}{6}h^3 + \frac{u^{(4)}(\xi_-)}{24}h^4 - 2u(x) + \right. \\ &\quad \left. + u(x) + u'(x)h + \frac{u''(x)}{2}h^2 + \frac{u^{(3)}(x)}{6}h^3 + \frac{u^{(4)}(\xi_+)}{24}h^4 \right] = \\ &= -\frac{u^{(4)}(\xi_-) + u^{(4)}(\xi_+)}{24} h^2. \end{aligned}$$

Используя формулу (4), заменим в каждом из внутренних узлов x_i , $1 \leq i \leq N-1$ дифференциальное уравнение (2) приближенным равенством

$$-\frac{u(x_{i-1}) - 2u(x_i) + u(x_{i+1}))}{h^2} + q_i u(x_i) \approx f_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad (5)$$

связывающим неизвестные значения решения в трех последовательных узлах сетки.

Потребуем теперь, чтобы значения искомой сеточной функции u^h удовлетворяли во всех внутренних узлах сетки уравнениям (5), в которых знак приближенного равенства заменен на знак равенства:

$$-\frac{u^h(x_{i-1}) - 2u^h(x_i) + u^h(x_{i+1}))}{h^2} + q_i u^h(x_i) = f_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad (6)$$

В результате дифференциальное уравнение (2) оказалось аппроксимированным его дискретным аналогом — разностным уравнением (6).

Естественно потребовать, чтобы в граничных узлах сеточная функция u^h удовлетворяла равенствам

$$u^h(x_0) = u_a, \quad u^h(x_N) = u_b. \quad (7)$$

Таким образом, мы пришли к системе линейных алгебраических уравнений (6), (7) в которой число уравнений совпадает с числом неизвестных $u_i = u^h(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, N$ и равно $N+1$. Решая эту систему — систему сеточных уравнений — можно найти сеточную функцию u^h .

Введем линейный разностный оператор L^h с помощью равенства

$$L^h[u^h](x_i) = -\frac{u^h(x_{i-1}) - 2u^h(x_i) + u^h(x_{i+1}))}{h^2} + q_i u^h(x_i), \quad x_i \in \mathbf{w}^h$$

и запишем систему сеточных уравнений (6), (7) в следующем виде

$$L^h[u^h] = f^h(x), \quad x \in \mathbf{w}^h, \quad (8)$$

$$u^h(x_0) = u_a, \quad u^h(x_N) = u_b. \quad (9)$$

Дискретную задачу (8), (9), зависящую от параметра h , принято называть **разностной схемой для краевой задачи** (2)–(3).

2.3 Вычисление решения разностной схемы с помощью метода прогонки

Приведем систему сеточных уравнений

$$-\frac{u^h(x_{i-1}) - 2u^h(x_i) + u^h(x_{i+1}))}{h^2} + q_i u^h(x_i) = f_i, \quad 1 \leq i \leq N-1,$$

$$u^h(x_0) = u_a, \quad u^h(x_N) = u_b.$$

к виду

$$-u_{i-1} + (2 + h^2 q_i)u_i + u_{i+1} = h^2 f_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad (10)$$

$$u_0 = u_a, \quad u_N = u_b. \quad (11)$$

Эта система есть частный случай системы линейных алгебраических уравнений вида

$$b_0 u_0 + c_0 u_1 = d_0,$$

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = d_i, \quad 1 \leq i \leq N-1,$$

$$a_N u_{N-1} + b_N u_N = d_N$$

матрица которой трехдиагональна. Здесь

$$a_i = -1, \quad b_i = 2 + h^2 q_i, \quad c_i = -1, \quad d_i = h^2 f_i, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (12)$$

$$b_0 = 1, \quad c_0 = 0, \quad d_0 = u_a, \quad a_N = 0, \quad b_N = 1, \quad d_N = u_b. \quad (13)$$

Эффективным методом решения таких систем является метод прогонки, вычисления которого состоят из двух этапов: **прямого и обратного хода**.

Прямой ход метода прогонки заключается в вычислении прогоночных коэффициентов α_i и β_i , $0 \leq i \leq N$. При $i = 0$ коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_0 = -\frac{c_0}{\gamma_0}, \quad \beta_0 = \frac{d_0}{\gamma_0}, \quad \gamma_0 = b_0,$$

а при $i = 1, 2, \dots, N-1$ — по рекуррентным формулам

$$\alpha_i = -\frac{c_i}{\gamma_i}, \quad \beta_i = \frac{d_i - a_i \beta_{i-1}}{\gamma_i}, \quad \gamma_i = b_i + a_i \alpha_{i-1}.$$

При $i = N$ прямой ход завершают вычислением значения

$$\beta_N = \frac{d_N - a_N \beta_{N-1}}{\gamma_N}, \quad \gamma_N = b_N + a_N \alpha_{N-1}.$$

Обратный ход метода прогонки дает значения неизвестных. Сначала полагают $u_N = \beta_N$, а затем значения остальных неизвестных находят по формуле

$$u_i = \alpha_i u_{i+1} + \beta_i.$$

Вычисления ведут в порядке убывания значения индекса i от $N - 1$ до 0.

Применительно к решению системы (10)–(11) расчетные формулы метода прогонки упрощаются.

В нашем случае прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_0 = 0, \quad \beta_0 = u_a, \quad \alpha_i = \frac{1}{2 + h^2 q_i - \alpha_{i-1}}, \quad \beta_i = \frac{h^2 f_i + \beta_{i-1}}{2 + h^2 q_i - \alpha_{i-1}}, \quad (14)$$

где $i = 1, 2, \dots, N - 1$.

Обратный ход дает значения неизвестных u_1, u_2, \dots, u_{N-1} ($u_0 = u_a$ и $u_N = u_b$ известны). Для этого производят вычисления по формулам

$$u_N = u_b, \quad u_i = \alpha_i u_{i+1} + \beta_i, \quad i = N - 1, N - 2, \dots, 1. \quad (15)$$

Замечание 1. Коэффициенты (12)–(13) удовлетворяют неравенствам

$$a_i \leq 0, \quad b_i > 0, \quad c_i < 0, \quad a_i + b_i + c_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (16)$$

Отсюда следует, что для системы (10)–(11) выполнены условия диагонального преобладания:

$$|b_0| \geq |c_0|, \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i| > |a_i|, \quad 1 \leq i < N, \quad |b_N| > |a_N|.$$

Поэтому вычисления по формуле (14) могут быть доведены до конца (ни один из знаменателей γ_i не обратиться в нуль). Кроме того, обратная прогонка устойчива по входным данным.

2.4 Оценка погрешности по правилу Рунге

На практике применяются апостериорные оценки погрешности, использующие расчеты на сгущающихся сетках. Пусть, например, u^h и u^{2h} — решения разностной схемы (8)–(9), соответствующие шагам $h_1 = h$ и $h_2 = 2h$. Тогда в соответствии с правилом Рунге при определенных условиях справедлива приближенная формула

$$\varepsilon^h(x) = u(x) - u^h(x) \approx \frac{u^h(x) - u^{2h}(x)}{3}, \quad x \in \omega^{2h}. \quad (17)$$

Отметим, что она применима только в узлах сетки ω^{2h} , т.е. там, где определены обе сеточные функции u^h и u^{2h} .

2.5 Иллюстративный пример решения в Excel

Используя разностную схему (8)–(9) с шагом $h = 1/8$, найдем приближенное решение краевой задачи

$$-u''(x) + x^2 u(x) = \left(\frac{\pi^2}{4} + x^2\right) \cos \frac{\pi}{2} x, \quad 0 < x < 1, \quad (18)$$

$$u(0) = 1, \quad u(1) = 0$$

и оценим его погрешность по правилу Рунге. Вычисления будем вести с шестью значащими цифрами.

В данном случае $q(x) = x^2$, $f(x) = \left(\frac{\pi^2}{4} + x^2\right) \cos \frac{\pi}{2} x$ и система сеточных уравнений (10)–(11) примет вид

$$\begin{aligned} u_0 &= 1, \\ -u_{i-1} + (2_h^2 x_i^2) u_i - u_{i+1} &= \left(\frac{\pi^2}{4} + x_i^2\right) \cos \frac{\pi}{2} x_i, \quad 1 \leq i \leq N-1, \\ u_N &= 0. \end{aligned}$$

При $h_1 = \frac{1}{8} = 0,125$, $x \in [0, 1]$ заполним таблицу (см. рис. 1).

1. Составим таблицу значений аргумента x (столбик B5:B13), учитывая, что $x \in [0, 1]$, $h=0,125$.
2. Заполним столбец C5:C13 соответствующими x значениями $q(x) = x^2$.
3. Заполним столбец D5:D13 соответствующими x значениями $f(x) = \left(\frac{\pi^2}{4} + x^2\right) \cos \frac{\pi}{2} x$.
4. По формулам (14) заполним столбец E5:E13. В E5 запишем значение $\alpha_0 = 0$, в E6 запишем формулу $\alpha_i = \frac{1}{2+h^2 q_i - \alpha_{i-1}}$ и растянем до E13.
5. По формулам (14) заполним столбец F5:F13. В F5 запишем значение $\beta_0 = u(0) = 1$, в F6 запишем формулу $\beta_i = \frac{h^2 f_i + \beta_{i-1}}{2+h^2 q_i - \alpha_{i-1}}$ и растянем до F13.
6. Ячейку G13 заполним значением $u(1) = 0$. Ячейку G12 заполним по формуле $u_i = \alpha_i u_{i+1} + \beta_i$ и растянем вверх до G5.
7. Поскольку известно точное решение этой задачи $u = \cos \frac{\pi}{2} x$, то запишем его в столбец I5:I13.
8. Поскольку известно точное решение, то погрешность можно найти по формуле $\varepsilon^h(x) = u(x) - u^h(x)$ и записать ее в столбец H5:H13.
9. Построим графики точного и приближенного решений (см. рис. 2) и график погрешности (см. рис.).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	u(0)=	1							
2	u(1)=	0							
3	h=	0,1250							
4	i	x	q(x)	f(x)	alpha	beta	ui	Epsilon	u_exact
5	0	0,000000	0,000000	2,467401	0,000000	1,000000	1,000000	0,000000	1
6	1	0,125000	0,015625	2,435315	0,499939	0,518963	0,981121	-0,000335	0,98079
7	2	0,250000	0,062500	2,337324	0,666206	0,370066	0,924429	-0,000549	0,92388
8	3	0,375000	0,140625	2,168494	0,748508	0,302359	0,832119	-0,000650	0,83147
9	4	0,500000	0,250000	1,921493	0,796560	0,264762	0,707756	-0,000649	0,70711
10	5	0,625000	0,390625	1,587834	0,826758	0,239406	0,556133	-0,000563	0,55557
11	6	0,750000	0,562500	1,159493	0,846002	0,217865	0,383095	-0,000412	0,38268
12	7	0,875000	0,765625	0,630732	0,857661	0,195307	0,195307	-0,000217	0,19509
13	8	1,000000	1,000000	0,000000	0,863585	0,168664	0,000000	0,000000	6,1E-17
14									

Рис. 1: Решение в Excel

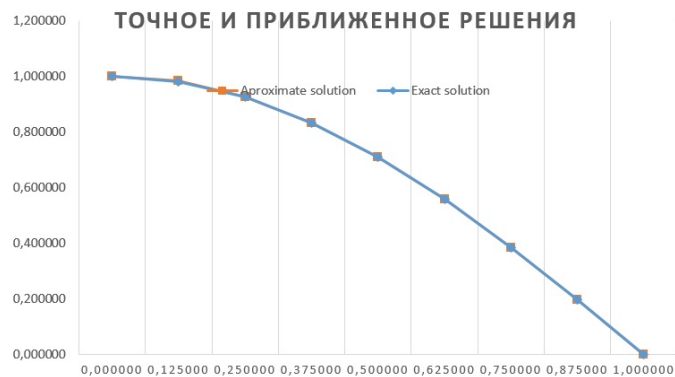


Рис. 2: График решения в Excel

3 Задача Штурма–Лиувилля и уравнение Шредингера

Задача Штурма–Лиувилля состоит в нахождении нетривиальных (то есть отличных от тождественного нуля) решений на промежутке (a, b) уравнения Штурма–Лиувилля

$$L[u] = \lambda \rho(x)u(x),$$

удовлетворяющих однородным краевым (граничным) условиям

$$\begin{aligned} \alpha_1 u'(a) + \beta_1 u(a) &= 0, & \alpha_1^2 + \beta_1^2 &\neq 0; \\ \alpha_2 u'(b) + \beta_2 u(b) &= 0, & \alpha_2^2 + \beta_2^2 &\neq 0; \end{aligned}$$

и значений параметра λ , при которых такие решения существуют.

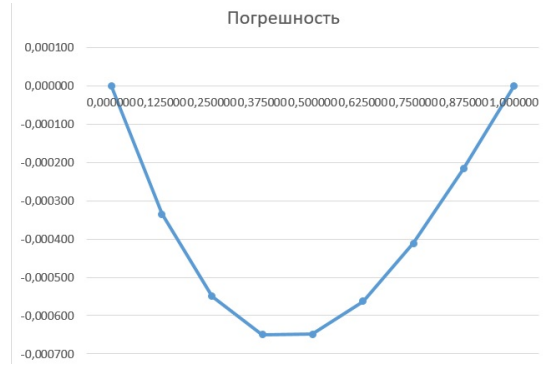


Рис. 3: График погрешности в Excel

Оператор $L[u]$ здесь — это действующий на функцию $u(x)$ линейный дифференциальный оператор второго порядка вида

$$L[u] \equiv \frac{d}{dx} \left[-p(x) \frac{du}{dx} \right] + q(x)u(x)$$

— оператор Штурма–Лиувилля или оператор Шрёдингера, x — вещественный аргумент.

Функции $p(x)$, $p'(x)$, $q(x)$, $\rho(x)$ предполагаются непрерывными на (a, b) , кроме того функции $p(x)$, $\rho(x)$ положительны на (a, b) .

Искомые нетривиальные решения называются собственными функциями этой задачи, а значения λ , при которых такое решение существует — её собственными значениями (каждому собственному значению соответствует собственная функция).

Если функции ρ и p дважды непрерывно дифференцируемы и положительны на отрезке $[a, b]$ и функция q непрерывна на $[a, b]$, то уравнение Штурма–Лиувилля вида

$$(p(x)u')' - q(x)u + \lambda\rho(x)u = 0$$

при помощи преобразования Лиувилля приводится к виду

$$-u''(x) + q_1(x)u(x) = \lambda u(x). \quad (19)$$

Поэтому часто рассматривают уравнение Штурма–Лиувилля в виде (19), функцию $q_1(x)$ называют потенциалом. Изучаются задачи Штурма–Лиувилля с потенциалами из разных классов функций: непрерывными, L (суммируемыми), L_2 и других. Виды краевых условий

- Условия Дирихле $u(a) = u(b) = 0$.
- Условия Неймана $u'(a) = u'(b) = 0$.
- Условия Робена $u'(a) - hu(a) = 0$, $u'(b) + Hu(b) = 0$.
- Смешанные условия: условия разных видов в разных концах отрезка $[a, b]$.

- Распадающиеся краевые условия общего вида

$$\begin{aligned}\alpha_1 u'(a) + \beta_1 u(a) &= 0, & \alpha_1^2 + \beta_1^2 &\neq 0; \\ \alpha_2 u'(b) + \beta_2 u(b) &= 0, & \alpha_2^2 + \beta_2^2 &\neq 0.\end{aligned}$$

- Периодические условия $u(a) = u(b)$, $u'(a) = u'(b)$.
- Антипериодические условия $u(a) = -u(b)$, $u'(a) = -u'(b)$.

Уравнение Шредингера, не зависящее от времени имеет вид (1)

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

Нетрудно видеть, что уравнение Шредингера совпадает с уравнением Штурма–Лиувилля в виде (19) при

$$q_1(x) = \frac{2m}{\hbar^2} U(x), \quad \lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

Например, уравнение квантового гармонического осциллятора приводится к виду

$$-u''(x) + (x^2 - \lambda)u(x) = 0. \quad (20)$$

Уравнение (20) совпадает с (2) при $q(x) = (x^2 - \lambda)$, $f(x) = 0$. Следовательно, добавив к нему условия

$$u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b.$$

Его можно решить численно на отрезке $[a, b]$ методом конечных разностей, как показано в разделе 2.

Аналогично, уравнение Шредингера

$$-u''(x) + q(x)u(x) = 0. \quad (21)$$

с условиями

$$u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b. \quad (22)$$

можно решить численно на отрезке $[a, b]$ методом конечных разностей, как показано в разделе 2, взяв $f(x) = 0$.

Уравнение Шредингера (21) решается явно лишь для небольшого числа потенциалов $q(x)$. В частности, при $q(x) = \text{const}$ и $q(x) = x^2$. Поэтому, для других потенциалов $q(x)$ будем искать численное решение задачи (21)–(22) и находить погрешность по правилу Рунге, измельчая сетку

$$\varepsilon^h(x) \approx \frac{u^h(x) - u^{2h}(x)}{3}, \quad x \in \omega^{2h}.$$

3.1 Иллюстративный пример решения в Excel

Используя разностную схему (8)–(9) с шагом $h = 1/8$, найдем приближенное решение краевой задачи

$$-u''(x) - \frac{3}{x^2}u(x) = 0, \quad 0,5 < x < 1,5; \quad (23)$$

$$u(0,5) = 1, \quad u(1,5) = 0$$

и оценим его погрешность по правилу Рунге. Вычисления будем вести с шестью значащими цифрами. Повторяя действия из раздела 2, получим результат, приведенный на Рис. 5.



Рис. 4: График решения в Excel

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	u(0,5)=	1							
2	u(1,5)=	0							
3	h=	0,1250	h1=	0,062500					
4	i	x	q(x)	f(x)	alpha	beta	ui	u2i	Epsilon
5	0	0,500000	-12,000000	0,000000	0,000000	2,000000	2,000000	0,000000	0
6	1	0,625000	-7,680000	0,000000	0,531915	1,063830	2,284994	-0,005380	-0,00179
7	2	0,750000	-5,333333	0,000000	0,722151	0,768246	2,295790	-0,008908	-0,00297
8	3	0,875000	-3,918367	0,000000	0,821946	0,631457	2,115269	-0,010370	-0,00346
9	4	1,000000	-3,000000	0,000000	0,884034	0,558229	1,805242	-0,010142	-0,00338
10	5	1,125000	-2,370370	0,000000	0,926845	0,517392	1,410594	-0,008661	-0,00289
11	6	1,250000	-1,920000	0,000000	0,958630	0,495987	0,963703	-0,006297	-0,0021
12	7	1,375000	-1,586777	0,000000	0,983694	0,487900	0,487900	-0,003337	-0,00111
13	8	1,500000	-1,333333	0,000000	1,004548	0,490118	0,000000	0,000000	0
14									

Рис. 5: Решения в Excel

Чтобы оценить погрешность по методу Рунге найдем решение с удвоенной точностью $h_1 = \frac{1}{16}$ (см. Рис. 6.)

Графики решения с точностями $h = \frac{1}{8}$ и $h_1 = \frac{1}{16}$ приведены на Рис. 4. График погрешности дан на Рис. 7.

	A	B	C	D	E	F	G
17	i	x	q(x)	f(x)	alpha	beta	ui
18	0	0,500000	-12,000000	0,000000	0,000000	2,000000	2,000000
19	1	0,562500	-9,481481	0,000000	0,509434	1,018868	2,185663
20	2	0,625000	-7,680000	0,000000	0,684666	0,697584	2,290375
21	3	0,687500	-6,347107	0,000000	0,774869	0,540537	2,326376
22	4	0,750000	-5,333333	0,000000	0,830360	0,448840	2,304698
23	5	0,812500	-4,544379	0,000000	0,868139	0,389655	2,235006
24	6	0,875000	-3,918367	0,000000	0,895612	0,348980	2,125639
25	7	0,937500	-3,413333	0,000000	0,916545	0,319856	1,983737
26	8	1,000000	-3,000000	0,000000	0,933065	0,298446	1,815385
27	9	1,062500	-2,657439	0,000000	0,946473	0,282471	1,625758
28	10	1,125000	-2,370370	0,000000	0,957609	0,270497	1,419256
29	11	1,187500	-2,127424	0,000000	0,967042	0,261582	1,199612
30	12	1,250000	-1,920000	0,000000	0,975174	0,255088	0,969999
31	13	1,312500	-1,741497	0,000000	0,982296	0,250572	0,733112
32	14	1,375000	-1,586777	0,000000	0,988625	0,247722	0,491237
33	15	1,437500	-1,451796	0,000000	0,994329	0,246317	0,246317
34	16	1,500000	-1,333333	0,000000	0,999537	0,246203	0,000000

Рис. 6: Решения с удвоенной точностью в Excel



Рис. 7: График погрешности в Excel

Задание 1.

Решить двухточечную краевую задачу для ЛОДУ второго порядка на отрезке $[a, b]$ с шагом $h = \frac{b-a}{N}$. Построить график решения $u = u(x)$ при $x \in [a, b]$. Варианты заданий в таблице 1.

Таблица 1.

Вариант	Дифференциальное уравнение	Краевые условия	$[a, b]$	N
1	$-u'' + xu = -\sin x$	$u(0) = 1, u(2) = 0$	$[0, 2]$	10
2	$-u'' + 2x^2u = -x$	$u(0) = 2, u(2) = 1$	$[0, 2]$	20
3	$-u'' + 3 \cos x u = -\operatorname{tg} x$	$u(0) = 3, u(1) = 2$	$[0, 1]$	30
4	$-u'' + xu = -\sin^2 x$	$u(0) = 1, u(2) = 3$	$[0, 2]$	40
5	$-u'' + \sin x u = -\sin x$	$u(0) = 2, u(2) = 4$	$[0, 2]$	50
6	$-u'' + \cos x u = -\sin x$	$u(1) = 3, u(2) = 1$	$[1, 2]$	10
7	$-u'' + 2x^2 u = -\cos x$	$u(1) = 1, u(2) = 2$	$[1, 2]$	20
8	$-u'' + \operatorname{tg}(x-1) u = -x$	$u(1) = 2, u(2) = 3$	$[1, 2]$	30
9	$-u'' + \sin x u = -\sin^3 x$	$u(1) = 3, u(2) = 2$	$[1, 2]$	40
10	$-u'' + \ln x u = -\sin x$	$u(1) = 1, u(2) = 0$	$[1, 2]$	50
11	$-u'' + \cos x u = -x$	$u(1) = 2, u(3) = 1$	$[1, 3]$	10
12	$-u'' + 2x^2 u = -x^2$	$u(1) = 3, u(3) = 2$	$[1, 3]$	20
13	$-u'' + \lg x u = -2^x$	$u(1) = 1, u(3) = 3$	$[1, 3]$	30
14	$-u'' + 2 \sin x u = -3x^3$	$u(1) = 2, u(3) = 2$	$[1, 3]$	40
15	$-u'' + 2 \ln x u = -(1+x)$	$u(1) = 3, u(3) = 4$	$[1, 3]$	50
16	$-u'' + \cos x u = -\cos^2 x$	$u(-1) = 2, u(1) = 2$	$[-1, 1]$	10
17	$-u'' + 2 x u = -\operatorname{tg} x$	$u(-1) = 1, u(1) = 1$	$[-1, 1]$	20
18	$-u'' + \operatorname{tg} x u = -e^{2x}$	$u(-1) = 3, u(1) = 0$	$[-1, 1]$	30
19	$-u'' + \ln(1+x^2) u = -\sin 2x$	$u(-1) = 1, u(1) = 2$	$[-1, 1]$	40
20	$-u'' + \sin x u = -\sin x$	$u(-1) = 2, u(1) = 1$	$[-1, 1]$	50
21	$-u'' + 2u = -\sin x$	$u(0) = 2, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	10
22	$-u'' + 3u = -\cos x$	$u(0) = 1, u(\pi) = 1$	$[0, \pi]$	20
23	$-u'' + 2xu = -x^3$	$u(0) = 2, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	30
24	$-u'' + xu = -x^4$	$u(0) = 3, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	40
25	$-u'' + 2x^2 u = -x^2$	$u(0) = 1, u(\pi) = 3$	$[0, \pi]$	50
26	$-u'' - \cos x u = -e^x \sin x$	$u(\pi/2) = 2, u(\pi) = 4$	$[\pi/2, \pi]$	10
27	$-u'' + 2x^2 u = -2x \sin x$	$u(\pi/2) = 3, u(\pi) = 2$	$[\pi/2, \pi]$	20
28	$-u'' 5u = -3^{2x}$	$u(\pi/2) = 1, u(\pi) = 1$	$[\pi/2, \pi]$	30
29	$-u'' + \sin x u = -\sin 3x$	$u(\pi/2) = 2, u(\pi) = 2$	$[\pi/2, \pi]$	40
30	$-u'' + \ln x u = -1$	$u(\pi/2) = 3, u(\pi) = 4$	$[\pi/2, \pi]$	50

Задание 2.

Решить двухточечную краевую задачу для уравнения Шредингера

$$-u''(x) + q(x)u(x) = 0,$$

$$u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b$$

на отрезке $[a, b]$ с шагом $h = \frac{b-a}{N}$. Построить график решения $u = u(x)$ при $x \in [a, b]$. Варианты заданий в таблице 2.

Таблица 2.

Вариант	Потенциал $q(x)$	Краевые условия	$[a, b]$	N
1	$\sin x$	$u(0) = 1, u(2) = 0$	$[0, 2]$	10
2	x^3	$u(0) = 2, u(2) = 1$	$[0, 2]$	20
3	$2x$	$u(0) = 3, u(1) = 2$	$[0, 1]$	30
4	$x^2 + 1$	$u(0) = 1, u(2) = 3$	$[0, 2]$	40
5	$\cos x$	$u(0) = 2, u(2) = 4$	$[0, 2]$	50
6	$\frac{1}{x}$	$u(1) = 3, u(2) = 1$	$[1, 2]$	10
7	$\frac{4}{x^2}$	$u(1) = 1, u(2) = 2$	$[1, 2]$	20
8	$\frac{3}{x^3}$	$u(1) = 2, u(2) = 3$	$[1, 2]$	30
9	$\ln x$	$u(1) = 3, u(2) = 2$	$[1, 2]$	40
10	e^{-x^2}	$u(1) = 1, u(2) = 0$	$[1, 2]$	50
11	$\operatorname{tg} x$	$u(1) = 2, u(3) = 1$	$[1, 3]$	10
12	$\operatorname{ch} x$	$u(1) = 3, u(3) = 2$	$[1, 3]$	20
13	$\operatorname{lg} x$	$u(1) = 1, u(3) = 3$	$[1, 3]$	30
14	$\operatorname{sh} x$	$u(1) = 2, u(3) = 2$	$[1, 3]$	40
15	$\frac{1}{1+x^2}$	$u(1) = 3, u(3) = 4$	$[1, 3]$	50
16	2^{-x}	$u(-1) = 2, u(1) = 2$	$[-1, 1]$	10
17	$\operatorname{tg}^2 x$	$u(-1) = 1, u(1) = 1$	$[-1, 1]$	20
18	$\frac{2}{x^4+1}$	$u(-1) = 3, u(1) = 0$	$[-1, 1]$	30
19	$-\operatorname{tg} 2x$	$u(-1) = 1, u(1) = 2$	$[-1, 1]$	40
20	$-x^3$	$u(-1) = 2, u(1) = 1$	$[-1, 1]$	50
21	$1 - \sin x$	$u(0) = 2, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	10
22	$1 - \cos x$	$u(0) = 1, u(\pi) = 1$	$[0, \pi]$	20
23	$-\sin x $	$u(0) = 2, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	30
24	$-x^4$	$u(0) = 3, u(\pi) = 2$	$[0, \pi]$	40
25	$-x^2$	$u(0) = 1, u(\pi) = 3$	$[0, \pi]$	50
26	e^x	$u(\pi/2) = 2, u(\pi) = 4$	$[\pi/2, \pi]$	10
27	-3^{-2x}	$u(\pi/2) = 3, u(\pi) = 2$	$[\pi/2, \pi]$	20
28	x^4	$u(\pi/2) = 1, u(\pi) = 1$	$[\pi/2, \pi]$	30
29	$\ln x$	$u(\pi/2) = 2, u(\pi) = 2$	$[\pi/2, \pi]$	40
30	$\ln(1+x^2)$	$u(\pi/2) = 3, u(\pi) = 4$	$[\pi/2, \pi]$	50