

А. С. Грибовский, А. Ю. Кравченко
(УО «ГГУ имени Ф. Скорины», Гомель)

Науч. рук. **В. В. Андреев**, д-р физ.-мат. наук, доцент

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА В СРЕДЕ WOLFRAM MATHEMATICA

С развитием компьютерных технологий, начали появляться программы, которые не требуют подключения специальных пакетов и включают в себя уже встроенные функции для построения графиков, моделирования процессов. Одной из таких программ является Wolfram Mathematica, с помощью данной программы можно также создавать программы.

Целью работы было реализация решения стационарного одномерного уравнения Шрёдингера численными методами с использованием встроенных функций в Wolfram Mathematica. Были рассмотрены прямоугольная потенциальная яма, гармонический осциллятор, запирающий потенциал, ангармонический осциллятор, которые имеют следующие виды соответственно:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \geq a \\ 0, & x < a \end{cases}$$
$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$
$$U(x) = \alpha x$$
$$U(x) = m x^2 + \epsilon x^4$$

Для решения уравнения Шрёдингера с заданными потенциалами использовался метод конечных разностей. Данный метод предполагает генерацию сетки узлов, замену производных на конечно разностных и затем получение матричных соотношений. Алгоритм реализован в программе Wolfram Mathematica приведенным на рисунке 1 кодом.

```
vecX = Table[a + i*h, {i, 0, n}];  
vecU = Table[U[vecX[[i]]], {i, n + 1}];  
mtrxH = Table[0, {i, 1, n + 1}, {j, n + 1}];  
Do[mtrxH[[i, i]] = vecU[[i]] + 1 / (h^2);  
  , {i, 1, n + 1}];  
Do[mtrxH[[i + 1, i]] = (-1) / (2. h^2);  
  mtrxH[[i, i + 1]] = (-1) / (2. h^2);  
  , {i, 1, n}];  
vecE = Table[Sort[Eigenvalues[mtrxH]][[i]], {i, 6}] / m;
```

Рисунок 1 — Программная реализация метода

Решения были получены для разного количества узлов. В приведенных ниже таблицах 1 – 3 сопоставлены собственные значения энергии, полученные с помощью численного метода, с их точными значениями.

Таблица 1 — Собственные значения энергии E_k для потенциальной ямы

n \ k	1	2	3	4	5
Точное	0,308 425	1,233 700	2,775 826	4,934 802	7,710 628
200	0,279 618	1,116 912	2,507 196	4,442 698	6,912 593
400	0,293 524	1,173 668	2,639 138	4,687 785	7,316 601
800	0,300 841	1,203 252	2,706 893	4,811 199	7,515 378
1600	0,304 591	1,218 335	2,741 146	4,872 879	7,613 330
3200	0,306 481	1,225 919	2,758 291	4,903 560	7,661 676

Таблица 2 — Собственные значения энергии E_k для гармонического осциллятора

n \ k	0	1	2	3	4
Точное	0,5	1,5	2,5	3,5	4,5
100	0,499 687	1,498 435	2,495 930	3,492 170	4,487 155
200	0,499 921	1,499 609	2,498 984	3,498 046	4,496 803
400	0,499 980	1,499 902	2,499 746	3,499 512	4,499 209
800	0,499 995	1,499 975	2,499 936	3,499 879	4,499 811
1600	0,499 998	1,499 993	2,499 984	3,499 970	4,499 961

Таблица 3 — Собственные значения энергии E_k для запирающего потенциала

n \ k	1	2	3	4
Точное	0,808 854	1,85 286	2,57 278	3,23 576
200	0,808 252	1,855 475	2,577 584	3,245 625
400	0,808 525	1,855 691	2,578 089	3,246 474
800	0,808 593	1,855 745	2,578 220	3,246 739
1600	0,808 610	1,855 759	2,578 255	3,246 832

Анализируя данные из таблицы 1, можно сделать вывод, что при уменьшении размера сетки в два раза погрешность уменьшалась так же в среднем в два раза. Видно, что при увеличении плотности сетки удаётся достигнуть точности порядка 10^{-3} , однако с увеличением уровней энергии точность падает.

В случае гармонического осциллятора такая точность достигается уже при $n = 50$. Увеличив количество узлов до 1600 можно получить точность порядка 10^{-6} .

Из данных таблицы 3 для запирающего потенциала следует, что при увеличении количества узлов сетки происходит уменьшение точности.

Точное решение задачи о спектре энергии такого осциллятора довольно трудоёмкое, поэтому для данного потенциала был проведён анализ сходимости при изменении количества узлов сетки.

Таблица 4 — Собственные значения энергии E_k для ангармонического осциллятора

n \ k	1	2	3	4	5
50	0,920 737	3,021 992	5,524 771	8,265 869	11,17 056
100	0,924 880	3,048 992	5,611 190	8,462 125	11,53 946
200	0,925 914	3,055 709	5,632 621	8,510 620	11,63 025
400	0,926 172	3,057 386	5,637 968	8,522 710	11,65 287
800	0,926 236	3,057 806	5,639 304	8,525 730	11,65 851
1600	0,926 253	3,057 910	5,639 638	8,526 485	11,65 993
3200	0,926 257	3,057 936	5,639 722	8,526 674	11.66 028

Анализируя данные, можно заметить, что значения энергий сходятся к определённым величинам. График сходимости значения первого энергетического уровня приведён на рисунке 2.

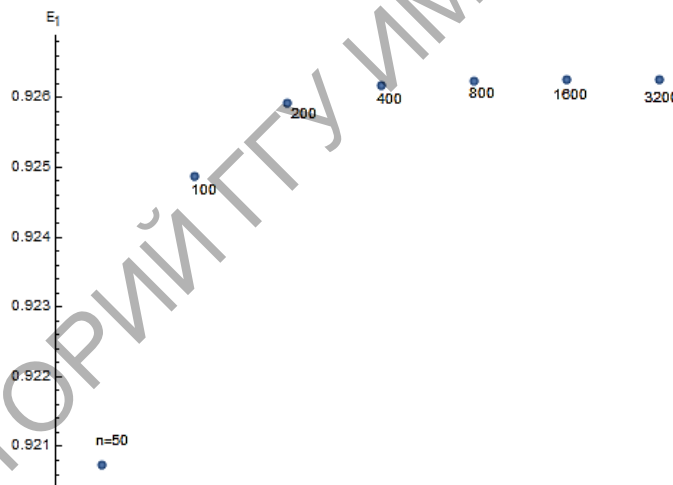


Рисунок 2 – Сходимость значения энергии

Из проведенной работы можно сделать вывод, что использование конечных разностей при численном решении уравнения Шрёдингера дает удовлетворительную для практических задач точность. Для гармонического осциллятора и прямоугольной потенциальной ямы, метод позволяет добиться высокой точности, а для запирающего потенциала использование данного метода приводит к тому, что при увеличении узлов сетки происходит потеря точности. В случае ангармонического осциллятора можно так же сказать, что метод применим, так как явно видна сходимость к некоторому значению.

Литература

1. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. – Москва : Мир, 1974. – Т. 2. – 341 с.
2. Sakurai, J.J. Modern Quantum Mechanics, 2nd Edition / J.J. Sakurai; Jim J. Napolitano – Pearson, 2011. – 550 с.

И.А. Зуев (УО «ГГТУ имени П.О. Сухого», Гомель)
Науч. рук. **Ю.Л. Бобарикин**, канд. техн. наук, доцент

РАЗРАБОТКА СПОСОБА ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ПРОКАТА И ИЗНОСОСТОЙКОСТИ ИНСТРУМЕНТА В УСЛОВИЯХ СТАНА 150 ОАО «БМЗ – УКХ «БМК»

В настоящее время одними из приоритетных задач сортопрокатного производства является повышение эффективности производства и снижение брака, которые могут быть достигнуты снижением рабочей температуры прокатки, оптимизацией скоростных режимов и калибровок валков.

Проблемы существующие в настоящее время связаны с отсутствием универсальной методики анализа, позволяющей на стадии проектирования определять форму калибра для получения готового продукта с наименьшими энергозатратами, с равномерным распределением напряжений, как по сечению проката, так и на рабочем инструменте (прокатных валках) с целью увеличения его срока службы.

В связи с изложенным, остро стоит необходимость в разработке и проектировании оптимальных калибровок валков для снижения энергозатрат прокатного производства, а также высокоточных методик расчета формоизменения полосы при прокатке.

Цель данной работы заключается в совершенствовании калибровки прокатных валков проволочного прокатного стана 150 ОАО «БМЗ – управляющая компания холдинга «БМК», с целью повышения качественных характеристик получаемого проката.

В данной работе, анализируется эффективность перехода с системы калибровки овал – круг, на систему калибровки овал – ребровый овал.

Для решения данной задачи было проведено численное моделирование в пакете Simufact Forming. Были построены две адекватные математические модели процесса прокатки катанки по двум калибровкам, базовой (применяемой) и проектной (предлагаемой). За основу процесса были выбраны прокатные клетки № 7–8, первой промежуточной группы клеток из технологической схемы производства катанки диаметром 5,5 мм, так как представляют наибольший интерес вследствие того, что испытывают одновременно термоциклический и механический износ.