

Для построения каскада требуются выборки изображений, содержащие искомый объект и не содержащие его. Репрезентативность и объём выборки оказывают большое влияние на эффективность каскада.

В процессе построения каскада с помощью негативных и позитивных образцов генерируются изображения, содержащие искомые предметы, для которых известно их местоположение, что позволяет производить отбор признаков, описывающих объект.

Для эффективного обнаружения различных дорожных знаков на фото, было построено 4 каскадных классификатора для каждой формы знаков – круглых, квадратных, треугольных и прямоугольных. Для построения использовалась выборка из 2250 негативных изображений. Количество позитивных изображений варьировалось от 100 до 350 в зависимости от формы.

Несмотря на небольшой объём выборок, построенные каскадные классификаторы в основном хорошо себя продемонстрировали при подборе соответствующих параметров. Каскадный классификатор для поиска прямоугольных знаков был единственным, для построения которого использовалось менее 200 позитивных примеров, и потому продемонстрировал наиболее низкую эффективность и высокий уровень ложных обнаружений.

Разработанное приложение продемонстрировало эффективность при тестировании. Использованная нейросеть верно классифицировала около 80% примеров тестового множества, а каскады Хаара продемонстрировали достаточно низкий уровень ложных обнаружений объектов на фотографии. Результаты могут быть улучшены, если при обучении нейросети и построении каскадов увеличить число различных примеров в выборках.

Литература

- 1 Уоссермен, Ф. Нейрокомпьютерная техника: теория и практика / Ф. Уоссермен. – М.: Мир, 1992. – 240 с.
- 2 Заенцев, И. В. Нейронные сети: основные модели / И. В. Заенцев – Воронеж: ВГУ – 1999 г. – 76 с.
- 3 LeCun, Y. Generalization and network design strategies / Y. LeCun – University of Toronto, Technical Report CRG-TR-89-4, Department of Computer Science– 1989 г. – 20 с.
- 4 Осовский, С. Нейронные сети для обработки информации / С. Осовский – Москва, Финансы и статистика – 2002 г. – 345 с.

УДК 539.126

Ф. Г. Самуха

ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ПОТЕНЦИАЛОМ МОРСА НА ЯЗЫКЕ JAVA

Описана интерактивная прикладная программа, разработанная на языке java и позволяющая в интерактивном режиме на графиках изучать поведение точного решения уравнения Шредингера с потенциалом Морса

Теоретические решения стационарного уравнения Шредингера для стандартных модельных потенциалов играют важную роль в изучении квантовой механики. Для лучшего понимания поведения этих решений полезно реализовать графическое отображение волновой функции и потенциала с возможностью изменять в интерактивном

режиме квантовые числа связанного состояния. В качестве языка программирования был выбран язык java [1].

Потенциал Морса широко используется для описания колебаний двухатомной молекулы. Одномерное стационарное уравнение Шредингера для потенциала Морса с параметрами D_l и α , определяющими его глубину и протяженность, имеет вид [2]:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2mD_l}{\hbar^2} e^{-2\alpha x} + \frac{4mD_l}{\hbar^2} e^{-\alpha x} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0. \quad (1)$$

При использовании замены

$$y = ke^{-2\alpha x} \quad \left(k = \frac{2\sqrt{2mD_l}}{\hbar\alpha} \right), \quad \beta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2)$$

уравнение (1) примет вид:

$$\left[y^2 \frac{d^2}{dy^2} + y \frac{d}{dy} - \frac{y^2}{4} + \frac{k}{2} y - \beta^2 \right] \psi(y) = 0. \quad (3)$$

В работе [3] решение уравнения (3) найдено в виде:

$$\psi(y) = y^A f(y), \quad (4)$$

где A – некоторая константа. Подстановка (4) в уравнение (3) приводит к дифференциальному уравнению вида

$$\left[y^2 \frac{d^2}{dy^2} + (2A + 1)y \frac{d}{dy} - \frac{y^2}{4} + \frac{k}{2} y + A^2 - \beta^2 \right] f(y) = 0. \quad (5)$$

Пусть $A = -\beta^2$ (случай $A = \beta^2$ не является физическим, т.к. $\psi(y)$ конечен при $y \rightarrow \infty$). Тогда:

$$\left[y \frac{d^2}{dy^2} + (2A + 1) \frac{d}{dy} - \frac{y}{4} + \frac{k}{2} \right] f(y) = 0. \quad (6)$$

Используя в (6) преобразование Лапласа

$$L[g(t)] = \int_0^\infty g(t) e^{-pt} dt = G(p)$$

Получаем уравнение уже первого порядка в пространстве изображений

$$\left(p^2 - \frac{1}{4} \right) \frac{d}{dp} F(p) + \left[(2\beta + 1)p - \frac{k}{2} \right] F(p) = 0, \quad (7)$$

решение которого имеет вид

$$F(p) = N'' \left(p + \frac{1}{2} \right)^{-(2\beta+1)} \left(1 - \frac{1}{p+\frac{1}{2}} \right)^{k-(2\beta+1)}, \quad (8)$$

причем $N'' = const$. В выражении (8) величина $\left(1 - \frac{1}{p+\frac{1}{2}} \right)^{k-(2\beta+1)}$ является многозначной функцией. Но волновые функции обязаны быть однозначными. Тогда

$$k - (2\beta + 1) = 2n, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Посредством выполнения обратного преобразования Лапласа и учета свойств вырожденной гипергеометрической функции и обобщенных потенциалов Лагерра, в работе [2] получен явный вид волновой функции для потенциала Морса

$$\psi(y) = N_n y^{\frac{k}{2} - (n + \frac{1}{2})} e^{-\frac{y}{2}} L_n^{k-2n-1}(y), \quad (10)$$

где N_n является нормировочной постоянной

$$N_n = \left[\frac{\alpha n! (k-2n-1)!}{\Gamma(k-n)} \right]^{1/2}. \quad (11)$$

Применяя выражения (2) и (9), можно выразить собственные значения оператора Гамильтона, то есть, энергетический спектр

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2m D_\varepsilon}}{\alpha \hbar} \right)^2. \quad (12)$$

Учитывая то, что в формуле (12) под корнем в числителе стоит выражение $k - 2n - 1$, то на решение налагивается условие, при котором $k = 2n + 1$.

Для графического и численного исследования точного решения уравнения (1) была разработана программа, которая отображает график данной функции в интерактивном режиме. Значения обобщенных потенциалов Лагерра вычислялись на основании их рекуррентных соотношений [4].

На рисунках 1–3 показан внешний вид программы. В её левой части расположены входные параметры, которые позволяют определить вид отображаемой функции. Если не установлен какой-либо параметр, то программа выберет те, которые были введены в прошлый раз либо установит значения по умолчанию.

Самую большую часть экрана занимает сам график. Для построения графиков в java был создан отдельный класс. Он позволяет выводить на экран одновременно 2 графика. Масштабирование проводится автоматически по 2-й функции. Также можно вывести график и одной функции, указав в качестве 2-го параметра пустое множество(null). Тогда масштабирование проведётся по непустому значению.

Изменять интервалы функции можно при помощи регулятора на экране или вручную, задав нужные значения в соответствующих окнах и нажав кнопку «Вычислить».

В правом верхнем углу отображается энергия выбранной функции при текущих значениях квантовых чисел k и n .

Также имеются подсказки, которые появляются при наведении курсора мыши на некоторые объекты программы.

Отдельные этапы работы с программой представлены на рисунках 1–3.

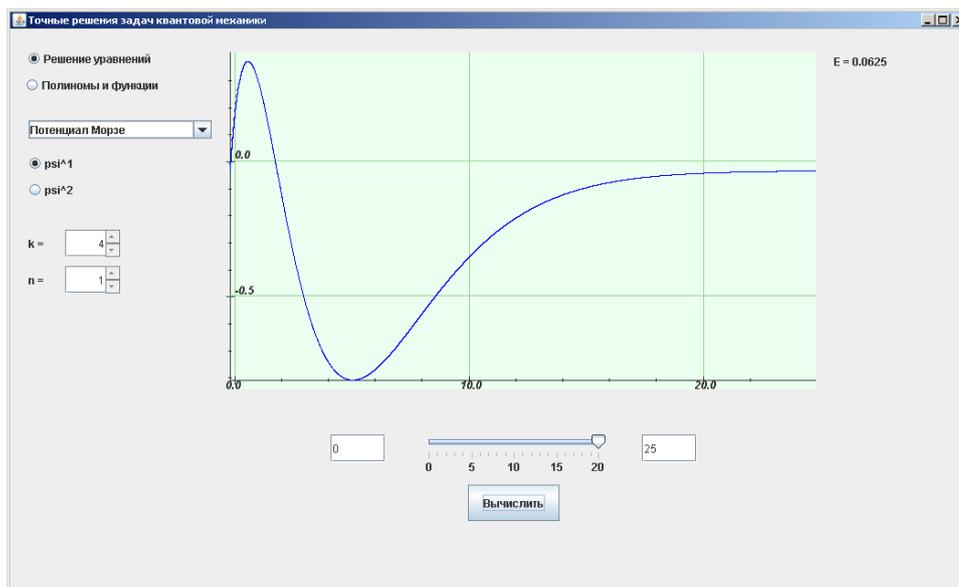


Рисунок 1 – Волновая функция уравнения Шредингера с потенциалом Морса при $n = 1$, $k = 4$

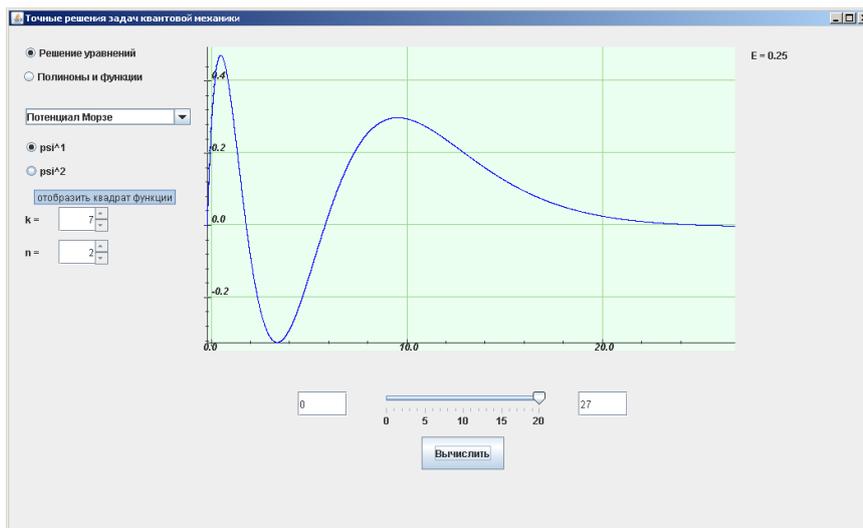


Рисунок 2– Волновая функция уравнения Шредингера с потенциалом Морса при $n = 2$, $k = 7$ со всплывающей подсказкой

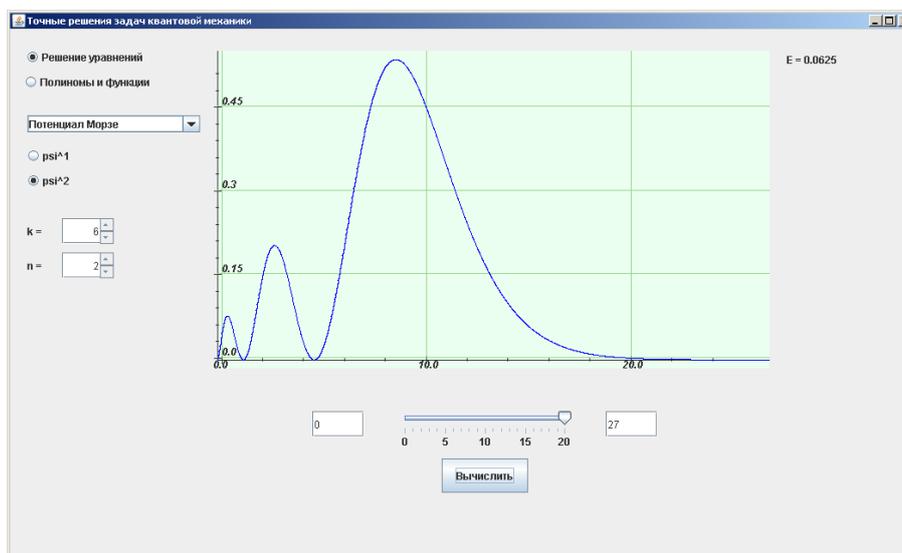


Рисунок 3– квадрат модуля волновой функции уравнения Шредингера с потенциалом Морса при $n = 6$, $k = 2$

Литература

1. Шилдт, Г. Полный справочник по Java / Г. Шилдт – М.: Вильямс, – 7-е изд., 2007. –1034 с.
2. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике т. 1 / З. Флюгге – М.: Наука, 1974. – 341с.
3. Gang Chen, The exact solutions of the Schrodinger equation with the Morse potential via Laplace transforms // Physics Letters A 326 (2004). – С. 55–57.
4. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган – М.: Наука, 1979. – 1024 с.