



دانشکده علوم ریاضی
گروه ریاضی کاربردی

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته‌ی
ریاضی کاربردی، گرایش آنالیز عددی

عنوان

روش‌های آشفتگی ثابت (CPM) از مرتبه بالا برای حل معادلات اشتورم - لیوویل و شرو دینگر

استاد راهنما
دکتر حسین خیری

استاد مشاور
دکتر مهدی صحت خواه

پژوهشگر
رضا سجودی

بهمن ۱۳۸۸

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

ستایش می‌کنم خداوند را، برای تکمیل نعمت‌های او و تسلیم بودن برابر بزرگی او و ایمن ماندن از نافرمانی او و در رفع نیازها از او یاری می‌طلبم، زیرا آن کس را که خدا هدایت کند، هرگز گمراه نگردد، و آن را که خدا دشمن دارد، هرگز نجات نیابد و هر آن کس را که خداوند بی‌نیاز گرداند، نیازمند نخواهد شد. پس ستایش خداوند گران‌سنگ‌ترین چیز است، و برترین گنجی است که ارزش ذخیره شدن دارد.

گواهی می‌دهم که خدا یکتاست، انبازی ندارد و بی‌همتا است. گواهی از روی اعتقاد و ایمان برآمده از امتحان، و گواهی می‌دهم که محمد (ص) بنده او و پیامبر اوست. او را بفرستاد با دینی آشکار، و با نشانه‌هایی پدیدار، و قرآنی نبشته در علم پروردگار که نوری است رخشان، و چراغی است فروزان، و دستورهایی روشن و عیان تا گرد دودلی از دلها بزداید، و با حجت و دلیل ملزم فرماید.

پاک خدایا! چه بزرگ است آنچه می‌بینم از خلقت تو، و چه خُرد است، بزرگی آن در کنار قدرت تو، و چه با عظمت است آنچه می‌بینم از ملکوت تو، و چه ناچیز است برابر آنچه بر ما نهان است از سلطنت تو، و چه فراگیر است نعمت تو در این جهان، و چه اندک است در کنار نعمت‌های آن جهان.

خدایا! اگر در پرستش خود درمانم یا راه پرسیدن را ندانم، صلاح کارم را به من نما و دلم را بدانچه رستگاری من در آن است متوجه فرما! که چنین کار از راهنمایی‌های تو ناشناخته نیست و از کفایت‌های تو نه.

از فرمایشات حضرت علی (ع)

تقدیم بہ:

فرشتگان پاک آسمان زندگی ام
پدر و مادر مہربانم
و ہمسر فداکارم و عموی شہیدش
پاسدار بسیجی
علی اصغر محمودی نژادی
و شہید راہ علم
دکتر علی محمدی

یاد و سپاس

به نام آنکه جان و فکرت آموخت

حمد و سپاس بیکران پروردگاری را سزد که در پرتو عنایات خداوندیش لحظه‌ای موجودات عالم از فیض وجودش بی‌بهره نیستند. در این بیکران هستی انسان‌های الهی‌اند که در پرتو انوار علم، قلب‌های خسته و زنگار گرفته از مُهر سکوت جاهلیت را جلا می‌دهند و طلایه‌دار کاروان بشریت می‌شوند. در ادامه این راه مقدس، لازم می‌دانم که صمیمانه‌ترین سپاس خویش را تقدیم اساتید محترمی نمایم که همواره در تمام دوران تحصیل راهنمایی بسیار مدبر و بزرگوارانی با محبت بوده‌اند تا بتوانم با مساعدت قلبی و علمی ایشان به این موفقیت دست یابم.

بخصوص سپاس بی‌شائبه خویش را تقدیم حضور بسیار گرانقدر استاد گرامی‌ام، جناب آقای دکتر خیری می‌نمایم که به یقین مشوقی صبور و راهنمای اصلی اینجانب در حصول این موفقیت بوده‌اند. در ضمن بر خود لازم می‌دانم از استاد گرانمایه جناب آقای دکتر جدیری که با حضور پربار خویش در جلسه دفاعیه مرا مرهون لطف خویش نموده‌اند و همچنین از جناب آقای دکتر چایچی مدیر گروه ریاضی و مشاور اینجانب جناب آقای دکتر صحت خواه به خاطر حضور در جلسه دفاعیه و مساعدت‌های ایشان کمال سپاس و تشکر را داشته باشم.

در پایان مراتب قدردانی خویش را به خانواده‌ام و تمام کسانی که به نحوی مرا در این مسیریاری نموده‌اند، تقدیم می‌نمایم. امیدوارم بتوانم آموخته‌هایم را در راه پیشرفت علمی وطن خویش مورد استفاده قرار دهم.

رضا سجودی

بهمن ۱۳۸۸

نام خانوادگی دانشجو: سجودی	نام: رضا
عنوان: روش‌های آشفته‌گی ثابت (CPM) از مرتبه بالا برای حل معادلات اشتورم - لیوویل و شرودینگر	
<p style="text-align: right;">استاد راهنما دکتر حسین خیری</p> <p style="text-align: right;">استاد مشاور دکتر مهدی صحت خواه</p>	
<p style="text-align: center;">مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: ریاضی کاربردی گرایش: آنالیز عددی</p> <p style="text-align: center;">دانشکده‌ی علوم ریاضی تاریخ فارغ‌التحصیلی: بهمن ۱۳۸۸ تعداد صفحه: ۳۸۸</p>	
کلید واژه‌ها: مسئله اشتورم - لیوویل - مسئله شرودینگر - روش‌های آشفته‌گی - مقدار ویژه - تابع ویژه - تابع پتانسیل	
<p style="text-align: right;">چکیده</p> <p>روش‌های آشفته‌گی تکه‌ایی (PPM)، روش‌های خاصی برای حل معادلات اشتورم-لیوویل و شرودینگر در نظریه معادلات دیفرانسیل می‌باشند، بطوریکه این روش‌ها از تکنیک‌های آشفته‌گی به عنوان ابزاری در جهت ساختار و اصلاح جواب و بهبود آن در مرتبه‌های بالای تقریب استفاده می‌کنند. این روش‌ها براساس ایده‌ای که روی هر گام از افزاینده‌ی تابع پتانسیل $V(x)$ که می‌توان به صورت $V(x) = \bar{V}(x) + \Delta V(x)$ نوشته شود، عمل می‌کند که در آن $\bar{V}(x)$ تابع پتانسیل معلوم مرجع یا مرتبه صفر است که معادله حاصل از آن به صورت تحلیلی حل می‌شود و $\Delta V(x)$ مقدار آشفته‌گی در جهت اصلاح جواب‌های مرتبه صفر می‌باشد. موفقیت تقریب وابسته به تأثیر محاسبه جواب‌های مرتبه صفر و اصلاحات مربوط به آن می‌باشد.</p> <p>در هر گام از روش‌های آشفته‌گی تکه‌ایی برای تابع پتانسیل $\bar{V}(x)$ معمولاً دو فرم رایج زیر در جهت تعیین ساختار جواب‌های مرتبه صفر مورد استفاده قرار می‌گیرد:</p> <p>(۱) تقریب‌های ثابت تکه‌ایی یا روش‌های آشفته‌گی توابع ثابت (CPM)،</p>	

۲) توابع خطی تکه‌ای پاروش‌های آشفته‌گی توابع خطی (LPM).

در هر دو روش فوق جواب‌های مرتبه صفرام و اصلاحات مربوط به آن دارای صورت‌های تحلیلی می‌باشند، با این وجود در روش‌های CPM علاوه بر کم بودن تعداد محاسبات، دارای سرعت اجرایی بالایی نسبت به روش‌های LPM می‌باشند که این دلیل تعمیم به روش‌هایی از اصلاحات آشفته‌گی بالا بر اساس جواب‌های مرتبه صفرام می‌باشد. همچنین بررسی‌های عددی بر اساس تأثیر محاسبات و پردازش کامپیوتری CPU بر پایه مدت زمان اجرای هر گام روی یک مرتبه از این روش‌ها ارجحیت روش‌های CPM را اثبات می‌کند.

روش‌های CPM علاوه بر حل مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر منظم، در حل معادلات شرودینگر طیفی با توابع پتانسیل کولونی و سیستم‌هایی از معادلات شرودینگر جفت شده به کار می‌روند. بر اساس این روش‌ها می‌توان نشان داد که خطای وابستگی انرژی کراندار است. با این مزایا، ساختار محاسباتی این روش‌ها دارای روند تحلیلی پیچیده‌ایی می‌باشد که می‌توان با استفاده از برنامه‌های محاسباتی این مانع را برطرف کرد (بسته نرم‌افزاری MATSLISE).

در این پایان‌نامه مفاهیم و تکنیک‌هایی در ارتباط با روش‌های جدیدی از CPM که دارای مرتبه‌های بالای $\{14, 12\}$ ، $\{16, 14\}$ و $\{18, 16\}$ می‌باشند را در جهت حل عددی مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر منظم یک بعدی ارائه می‌کنیم. همچنین به وسیله این روش‌ها معادلات شرودینگر طیفی با تابع پتانسیل $V(r) = \frac{S(r)}{r} + R(r)$ را که در آن $S(r)$ و $R(r)$ توابعی خوش تعریف اند در شرایط ویژه $r \rightarrow 0$ و $r \rightarrow \infty$ مورد بررسی قرار می‌دهیم.

فهرست مطالب

۱۱	مقدمه
۱۶	تعاریف و مطالب بنیادی مسائل اشتورم - لیوویل و شرودینگر	۱
۱۷	۱.۱ مفاهیم اولیه
۲۰	۲.۱ مسائل اشتورم - لیوویل
۲۰	۱.۲.۱ تعریف مسئله اشتورم - لیوویل
۳۰	۲.۲.۱ کاربرد مسئله اشتورم - لیوویل
۳۲	۳.۲.۱ انواع مسائل اشتورم - لیوویل
۳۷	۴.۲.۱ انواع شرایط مرزی مسئله اشتورم - لیوویل
۴۱	۵.۲.۱ ویژگیهای اساسی مسئله اشتورم - لیوویل
۶۰	۳.۱ مسائل شرودینگر
۶۰	۱.۳.۱ تعریف مسائل شرودینگر از دیدگاه رخدادهای کوانتومی و اتمی
۶۶	۲.۳.۱ تعریف مسائل شرودینگر از دیدگاه ریاضی
۷۱	۳.۳.۱ معادلات شرودینگر طیفی با پتانسیل کولونی تغییر شکل داده شده
۷۷	۴.۱ تبدیلها
۸۱	۲ روشهای عددی

۸۳	روش تفاضل مرکزی	۱.۲
۸۷	روش نیومرو	۲.۲
۸۹	۱.۲.۲ برونابی ریچاردسون	
۹۴	روش مجانبی عددی	۳.۲
۹۶	روش تغییراتی	۴.۲
۱۱۰	روش تکراری تغییرات	۵.۲
۱۱۴	روش پرتابی	۶.۲
۱۲۲	۱.۶.۲ تبدیلات پروفور	
۱۳۵	روش پروس	۷.۲
۱۳۶	۱.۷.۲ همگرایی روش پروس	
۱۴۳	۲.۷.۲ روش عددی پروس یا تقریب‌های تکه‌ای پروس	
۱۴۹	۳.۷.۲ مقیاس‌گیری مجدد در افزایش ناگهانی تابع مقیاسی S	
۱۵۱	روش‌های آشفته‌گی تکه‌ای	۸.۲
۱۵۳	۱.۸.۲ معادله مرجع	
۱۶۰	۲.۸.۲ اصلاحات آشفته‌گی	
۱۶۵	خاتمه و نتیجه‌گیری	۹.۲

۳ روش‌های آشفته‌گی ثابت و مرتبه‌های بالای آن ۱۶۹

۱۷۰	روش‌های آشفته‌گی ثابت از مرتبه q (CPM(q)) برای معادله شرودینگر	۱.۳
۱۷۱	۱.۱.۳ معادله مرجع	

۱۸۰ ساختاری از اصلاحات آشفته‌گی در روش‌های CPM(q)	۲.۱.۳
۱۹۱ معادله مرجع آزمایشی	۳.۱.۳
۲۰۲ روش‌های CPM[N,Q]	۴.۱.۳
۲۰۵ آنالیز خطا در روش‌های CPM[N,Q]	۵.۱.۳
۲۱۰ خطای وابستگی انرژی	۶.۱.۳
۲۱۲ حل مسئله مقدار مرزی با استفاده از روش‌های CPM	۲.۳
۲۱۲ یک فرآیند پرتابی با استفاده از روش‌های CPM	۱.۲.۳
۲۱۵ تابع عدم تطابق در روش‌های CPM	۲.۲.۳
۲۱۸ انتخاب نقطه مناسب در روش‌های CPM	۳.۲.۳
۲۱۸ نمایش تبدیل پروفور در روش‌های CPM	۴.۲.۳
۲۲۳ محاسبه مقدار ویژه در روش‌های CPM	۵.۲.۳
۲۲۸ اجرای تبدیل لیوویل در روش‌های CPM	۶.۲.۳
۲۲۹ روش‌های مرتبه بالای $CPM\{P,N\}$	۳.۳
۲۳۴ انتخاب طول گام از یک افرازبندی در روش‌های $CPM\{P,N\}$	۱.۳.۳
۲۴۱ حل مسائل شرودینگر و اشتورم - لیوویل به وسیله روش‌های مرتبه بالای CPM	۴.۳
۲۶۳ خاتمه و نتیجه‌گیری	۵.۳

۴ بسته نرم‌افزاری MATSLISE ۲۶۴

۲۶۵ زبان محاسباتی MATLAB	۱.۴
۲۶۶ بسته نرم‌افزاری MATSLISE	۲.۴
۲۷۱ مرحله اول: ساختار تقسیم‌بندی و تبدیل لیوویل	۱.۲.۴
۲۷۵ مرحله دوم: محاسبه مقدار ویژه	۲.۲.۴
۲۷۷ مرحله سوم: محاسبه توابع ویژه	۳.۲.۴

۲۸۵	واسطه گرافیکی کاربر	۳.۴
۲۸۶	پنجره مشخصات مسئله	۱.۳.۴
۲۸۷	پنجره مقادیر ویژه	۲.۳.۴
۲۸۸	محاسبه و رسم توابع ویژه	۳.۳.۴
۲۹۱	فرآیند تقلیل به نصف بازه	۴.۳.۴
۲۹۴	استفاده از پارامترها	۵.۳.۴
۲۹۸	خاتمه و نتیجه‌گیری	۴.۴

۲۹۹ ۵ نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۳۲۰ مراجع

۳۲۹ واژه‌نامه

۳۴۳ پیوست‌ها

فهرست جدول‌ها

جدول ۱.۲	مقادیر ویژه و خطاهای روش تفاضل مرکزی	صفحه ۸۶
جدول ۲.۲	مقادیر ویژه و خطاهای روش نیومرو	صفحه ۸۸
جدول ۳.۲	دو مقدار ویژه حاصل از دوبار تکرار روش برون‌یابی ریچاردسون	صفحه ۹۱
جدول ۴.۲	مقادیر ویژه و خطاهای حاصل از برون‌یابی ریچاردسون	صفحه ۹۲
جدول ۵.۲	مقادیر ویژه و خطاهای حاصل از روش مجانبی عددی	صفحه ۹۶
جدول ۶.۲	مقادیر ویژه و خطاهای حاصل از روش تغییراتی	صفحه ۱۰۴
جدول ۷.۲	مقایسه‌ای بین خطاهای روش‌های مجانبی عددی، نیومرو و تغییراتی	صفحه ۱۰۹
جدول ۸.۲	خطاهای دو مقدار ویژه حاصل از تقریب تکه‌ای از نوع نقطه میانی ثابت	صفحه ۱۴۲
جدول ۱.۳	شش مقدار ویژه متفاوت از مسئله متیو	صفحه ۲۰۴
جدول ۲.۳	انتشار جواب برای مسئله متیو	صفحه ۲۴۶
جدول ۳.۳	هفت مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله وودس - ساکسون	صفحه ۲۴۸
جدول ۴.۳	نه مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله کوفی - اوانس ($\beta = 20$)	صفحه ۲۴۹
جدول ۵.۳	نه مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله کوفی - اوانس ($\beta = 20$)	صفحه ۲۴۹
جدول ۶.۳	شش مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله متیو	صفحه ۲۵۰
جدول ۷.۳	پنج مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله اشتورم - لیوویل	صفحه ۲۵۱
جدول ۸.۳	شش مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله اشتورم - لیوویل	صفحه ۲۵۲
جدول ۹.۳	شش مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله پین	صفحه ۲۵۳
جدول ۱۰.۳	محاسبه مقادیر ویژه مرتبه بالا از مسئله شرودینگر متیو	صفحه ۲۵۵
جدول ۱۱.۳	شش مقدار ویژه محاسبه شده از مساله اتم هیدروژن ($l = 1$)	صفحه ۲۵۸
جدول ۱۲.۳	بیست و دو مقدار ویژه محاسبه شده از مسئله اتم هیدروژن ($l = 1$)	صفحه ۲۵۹

- جدول ۱.۴ مقایسه خطاهای شش مقدار ویژه حاصل شده توسط بسته‌های نرم‌افزاری صفحه ۲۶۹
- جدول ۲.۴ زمان‌های مورد نیاز برای محاسبه مقادیر ویژه از مسائل متیو و هیدروژن . . صفحه ۲۷۷

فهرست شکل‌ها

عکس ۱.۱	دو دانشمند نظریه معادلات دیفرانسیل اشتورم – لیوویل	صفحه ۲۱
شکل ۲.۱	چهار تابع ویژه اول از مسئله $-y'' = \lambda y$	صفحه ۳۰
عکس ۳.۱	فیزیکدان اتریشی اروین شرودینگر	صفحه ۶۱
شکل ۴.۱	توزیع احتمالی الکترون‌ها	صفحه ۶۳
شکل ۵.۱	تراکم احتمالی الکترون‌ها برای اتم هیدروژن	صفحه ۶۴
شکل ۶.۱	تراکم احتمالی الکترون‌ها برای چند اربیتال از اتم هیدروژن	صفحه ۶۵
شکل ۷.۱	تابع پتانسیل $V(x) = 2/x^2 - 1/x$ از اتم هیدروژن حول مبدأ مختصات	صفحه ۷۷
شکل ۱.۲	توابع کلاهی خطی	صفحه ۱۰۲
شکل ۲.۲	فرآیند روش پرتابی برای مسئله $-y'' = Ey$ با $y(0) = y(\pi) = 0$	صفحه ۱۱۷
شکل ۳.۲	تابع عدم تطابق برای مسئله $-y'' = Ey$ و $(E = \lambda)$	صفحه ۱۲۱
شکل ۴.۲	توابع پرورفر برای مسئله پین	صفحه ۱۳۲
شکل ۵.۲	توابع پرورفر غیرمقیاسی برای مسائل پین و کوفی – اوانس	صفحه ۱۳۴
شکل ۶.۲	یک تقریب نقطه میانی ثابت تکه‌ایی از تابع $f(x)$	صفحه ۱۳۶
شکل ۷.۲	تابع پتانسیل مسئله کوفی – اوانس و تقریب ثابت تکه‌ایی با $\beta = 20$	صفحه ۱۵۸
شکل ۱.۳	توابع اصلی $\xi(z)$ و $\eta_0(z)$ برای روش‌های آشفته‌گی ثابت	صفحه ۱۷۳
شکل ۲.۳	توابع اصلی $\eta_1(z)$ و $\eta_2(z)$ برای روش‌های آشفته‌گی ثابت	صفحه ۱۸۲
شکل ۳.۳	تابع پتانسیل مسئله متیو	صفحه ۲۰۴
شکل ۴.۳	تابع ضریب $c_{15}(z)$	صفحه ۲۳۷
شکل ۵.۳	تقریب ثابت تکه‌ایی از تابع پتانسیل متیو به وسیله روش $CPM\{12, 10\}$	صفحه ۲۴۳
شکل ۶.۳	تقریب ثابت تکه‌ایی از تابع پتانسیل مسئله متیو	صفحه ۲۴۴

- شکل ۷.۳ تابع پتانسیل مسئله کوفی - اوانس با $\beta = 20$ صفحه ۲۴۵
- شکل ۸.۳ مقادیر ویژه و توابع ویژه و تابع پتانسیل مسئله اتم هیدروژن صفحه ۲۵۹
- شکل ۹.۳ تعیین مقدار b^* با استفاده از شرایط WKB صفحه ۲۶۱
- شکل ۱.۴ ترسیمی از افزاینده توسط MATSLISE برای پتانسیل کوفی - اوانس .. صفحه ۲۸۰
- شکل ۲.۴ تابع ویژه برای پتانسیل کوفی - اوانس با $\beta = 30$ صفحه ۲۸۲
- شکل ۳.۴ تابع پتانسیل کوفی - اوانس برای مقادیر مختلف β صفحه ۲۸۳
- شکل ۴.۴ پنجره ورودی مشخصات MATSLISE_GUI برای مسئله کوفی - اوانس . صفحه ۲۸۷
- شکل ۵.۴ پنجره مقادیر ویژه از MATSLISE_GUI برای مسئله کوفی - اوانس صفحه ۲۸۸
- شکل ۶.۴ پنجره تابع ویژه $y_8(x)$ از مسئله کوفی - اوانس در MATSLISE_GUI صفحه ۲۸۹
- شکل ۷.۴ پنجره توابع ویژه از مسئله کوفی - اوانس در MATSLISE_GUI صفحه ۲۹۰
- شکل ۸.۴ توابع ویژه محاسبه شده از مسئله مقادیر ویژه نزدیک به هم صفحه ۲۹۳
- شکل ۹.۴ استفاده از فرآیند HRR در مسئله مقادیر ویژه نزدیک به هم صفحه ۲۹۴
- شکل ۱۰.۴ پنجره تابع پتانسیل کوفی - اوانس در MATSLISE_GUI صفحه ۲۹۶
- شکل ۱۱.۴ پنجره رسم مقادیر ویژه از مسئله کوفی - اوانس در MATSLISE_GUI .. صفحه ۲۹۷
- شکل ۱۲.۴ پنجره تابع ویژه $y_2(x)$ از مسئله کوفی - اوانس در MATSLISE_GUI .. صفحه ۲۹۸

فهرست الگوریتم‌ها

الگوریتم ۱.۲	روش پروس با استفاده از فرآیند پرتابی	صفحه ۱۴۸
الگوریتم ۱.۳	فرآیند پرتابی با استفاده از روش‌های CPM	صفحه ۲۱۳
الگوریتم ۲.۳	محاسبه مقادیر ویژه میان λ_{\min} و λ_{\max} به وسیله روش‌های CPM	صفحه ۲۲۴
الگوریتم ۳.۳	محاسبه مقدار اولیه λ برای فرآیند تکراری نیوتن در روش‌های CPM	صفحه ۲۲۶

مقدمه

فرموله کردن پدیده‌های طبیعی منجر به حل معادلات دیفرانسیل می‌شوند که رده وسیعی از این معادلات، به صورت معادله مرتبه دوم و یا قابل تقریب به وسیله آن هستند به طوریکه پیشرفت عظیم علوم مهندسی و پایه در دو قرن اخیر را باید مدیون نظریه معادلات دانست. یکی از حالت‌های خاص معادلات مرتبه دوم، معادله اشتورم-لیوویل

$$-\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{dy(x)}{dx}\right] + q(x)y(x) = \lambda w(x)y(x), \quad x \in [a, b]$$

است. معادله دیفرانسیلی که دارای شرایط مناسبی باشد، می‌توان آن را با تبدیلات لیوویل به صورت معادله اشتورم-لیوویل نورمال

$$-y'' + q(x)y = \lambda y, \quad x \in [a, b]$$

بیان کرد. این معادله یکی از اساسی‌ترین معادلات غیرنسبیتی فیزیک کوانتوم می‌باشد که در مباحث انتشار و پخش امواج از تمامی اجسام کوانتومی و اتمی به معادله شرودینگر معروف است. مکانیک کوانتوم برای بررسی خواص اتم‌ها و مولکول‌ها و هسته‌های اتمی و توده‌های آنها ضروری است. از آنجایی که بررسی اجسام خیلی کوچک با جرم کم و ناچیز، خارج از محدوده فیزیک کلاسیک می‌باشد به همین خاطر این مسائل در فیزیک جدید و مدرن بحث و بررسی می‌شود. همچنین طیف وسیعی از مسائل مهم فیزیک و مکانیک کوانتوم و علوم دیگر قابل بیان با مسئله اشتورم-لیوویل و شرودینگر هستند، به طور مثال معادله موج یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی مرتبه دوم می‌باشد که با استفاده از روش جداسازی متغیرها می‌توان آن را به مسئله اشتورم-لیوویل تبدیل کرد و بسیاری از معادلات دیگر نظیر معادلات دیفرانسیل لاگرانژ و بسل که در علوم دیگر کاربرد فراوانی دارند، قابل بیان با معادلات اشتورم-لیوویل و شرودینگر هستند. رفتار و حالت الکترون‌های دور

هسته پرتونی با معادلات شرودینگر (طیفی) بیان می‌شوند. لذا با مطالعه معادلات اشتورم-لیوویل و شرودینگر می‌توان طیف وسیعی از مسائل کاربردی را بررسی کرد. مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر از دیرباز مورد توجه محققین بوده به طوریکه تا به حال صدها مطلب و مقاله و چندین کتاب در این زمینه نوشته شده است به طوریکه نظریه عمومی مقادیر ویژه و توابع ویژه مرتبط با آن یکی از عمیقترین بخش‌های ریاضی نوین است.

در مسائل مستقیم اشتورم-لیوویل و شرودینگر توابع پتانسیل $q(x)$ و $V(x)$ معلوم بوده و هدف تقریب مقادیر ویژه λ_k (سطوح انرژی) مربوط به توابع ویژه $y_k(x)$ (توابع موج) است. مثلاً در مسئله فیزیکی ارتعاش نخ (ساده‌ترین مسئله نوسان در فیزیک کلاسیک) λ_k ها نشان دهنده فرکانس سطح k ام می‌باشند. سرچشمه این مطالعات از آنجا شروع شد که دانیل برنولی و لئونارد اویلر در سال ۱۸۷۷ مسائل ارتعاشات تار (مانند سیستم‌های شبیه به پاندول یا آونگ، ارتعاش صدا و...) را به وسیله معادله کلاسیک اشتورم-لیوویل که توسط دو دانشمند فرانسوی به نامهای ژاکوس چارلز فرانسیس اشتورم (۱۸۵۵-۱۸۰۳) و ژرف لیوویل (۱۸۸۲-۱۸۰۹) مطرح شده بود، در فیزیک کلاسیک بیان کردند. بعدها فیزیکدان اتریشی اروین شرودینگر (۱۹۶۱-۱۸۸۷) برای اولین بار در اواسط سال ۱۹۲۰ تحت عنوان مقاله‌ای به نام تئوری مکانیک مولکول‌ها و اتم‌ها در مسائل کوانتوم، ساختارهایی از طبیعت دوگانگی ماده را بحث کرد که روی خاصیت‌های شبیه به موج از الکترون‌ها متمرکز می‌شد. او با مشاهده رفتار الکترون‌ها همانند موجهای قائم (عین رشته‌های گیتار) به جای مسیرهای ذره، سطوح انرژی‌های متفاوتی را توسط آزمایش‌هایی توضیح داد. شرودینگر یک مدل ریاضی را بر اساس ریاضیات موجی برای توضیح دادن مکان الکترون‌ها (احتمال تراکم الکترون‌ها) در یک اتم ذره را توسعه داد. از حل معادله شرودینگر برای یک اتم، جوابهایی حاصل می‌شوند که هر کدام از این جوابها مطابق با یک اربیتال متفاوت از اتم یک ذره می‌باشد. بطوریکه معادله شرودینگر

برای این اربیتالها دقیقاً توضیح نمی‌دهد که چگونه الکترون‌ها به دور هسته در حرکتند، بلکه احتمال تراکم وجود آنها در یک مکان معین به دور هسته (پروتون) را بیان می‌کند.

مسئله تقریب مقادیر ویژه برای مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر و تخمین خطای آن‌ها همواره به صورت گسترده مورد بحث قرار گرفته است بطوریکه برای محاسبه این مقادیر روش‌های متعددی پیشنهاد شده است. روش‌های آشفتگی تکه‌ای (PPM) یکی از روش‌های تقریب آشفتگی در حوزه ریاضی و فیزیک برای معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم خطی است که دارای تأثیر بسیار زیادی بر توابع پتانسیل $q(x)$ و $V(x)$ می‌باشد بطوریکه این توابع تحت تأثیر آشفتگی و اصلاحات آن روی یک بازه یا زیربازه تبدیل به توابع پتانسیل مرجع شده و می‌توان معادلات حاصل از این توابع را به صورت عددی حل کرد. ایکسارو برای اولین بار در سال 1970 روش‌های آشفتگی تکه‌ای را برای حل عددی مسائل شرودینگر طی دو مقاله

1) Ixaru, L.Gr., *Choosing step sizes for perturbative methods of solving the Schrodinger equation*, Comput, Phys Commun 36, (1980), 170-181.

2) Ixaru, L.Gr., *Perturbative numerical methods for the Schrodinger equation*, Comput, Phys Commun 20, (1980), 97-112.

پیشنهاد کرد که بعدها در کتابش این روش‌ها را به دو دسته آشفتگی‌های حاصل از تقریب‌های ثابت (CPM) و آشفتگی‌های حاصل از توابع خطی (LPM) برای حالت‌های کلی معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم خطی اصلاح و تعمیم داد. از آنجایی که روش‌های CPM بر روش‌های LPM طبق دلایلی ارجحیت دارد لذا در این پایان‌نامه به طور مفصل به روش‌های CPM می‌پردازیم. اما در تئوری آشفتگی میان جواب معادله مرجع و جواب معادله اصلی یک تخمین انحرافی زنده می‌شود. بعضی از اصلاحات آشفتگی برای بدست آوردن دقت تقریب بیشتر از جواب معادله اصلی می‌تواند به جواب

معادله مرجع اضافه شود. در حقیقت انگیزه تقریب آشفته‌گی به وسیله قرارداد در جواب تقریب بیان می‌شود، به همین خاطر یک جواب مرتبه صفرام تکه‌ای از تقریب مسئله بعلاوه یک تعداد از اصطلاحات از همین جواب، دقت تقریب بیشتری از y را محاسبه می‌کند، حتی اگر فاقد هر گونه اصطلاحات آشفته‌گی باشیم. ایکسارو در سال ۱۹۹۹ طی مقاله‌ای یکی از روش‌های مرتبه بالای CPM یعنی $CPM\{12,10\}$ را معرفی کرد که بعدها این روش توسط لیدوکس به روش‌های $CPM\{14,12\}$ ، $CPM\{16,14\}$ و $CPM\{18,16\}$ تعمیم یافت.

این پایان‌نامه مشتمل بر پنج فصل می‌باشد. در فصل اول اهم مطالب و مفاهیم اولیه در ارتباط با مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر و تبدیلات لیوویل مابین آنها که در فصل‌های آتی مورد نیاز خواهند بود، جمع آوری شده است. فصل دوم به روش‌های عددی معمول برای تقریب مقادیر ویژه مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر که در دهه‌های اخیر مطرح بوده است، می‌پردازد که می‌توان به روش‌های تفاضلات متناهی، عناصر متناهی و برونمایی ریچاردسون در ارتباط با این روش‌ها، روش‌های تغییراتی و تکرار این روش‌ها، روش‌های پرتابی و تبدیلات پروفِر آن، روش‌های تقریب ضرایب و روش‌های PPM اشاره کرد. فصل سوم که به عنوان اصلی‌ترین فصل از این پایان‌نامه مطرح می‌باشد به ساختارها و خطاهایی در ارتباط با روش‌های آشفته‌گی ثابت (CPM) و مرتبه‌های بالا آن بر اساس تقریب‌های ثابت تکه‌ای از تابع پتانسیل مسئله شرودینگر و روش‌های پرتابی و تبدیلات پروفِر مربوط به این روش‌ها اشاره شده است. در آخرین فصل به مسئله اتم هیدروژن به عنوان یک مسئله کاربردی در فیزیک اتمی و نحوه حل مسئله شرودینگر طیفی در ارتباط با این اتم با استفاده از روش‌های مرتبه بالای آشفته‌گی ثابت ارائه شده است. در فصل چهارم برنامه محاسباتی MATSLISE برای حل مسائل اشتورم-لیوویل و شرودینگر که در محیط برنامه نویسی MATLAB نوشته شده است در دو بخش دستورات محاسباتی و واسطه گرافیکی کاربر (GUI) بر