دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم ریاضی

گروه ریاضی کاربردی

پایان‌نامه

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 شرودینگر

استاد راهنما

دکترحسین خیری

استاد مشاور

دکتر مهدی صحت خواه

پژوهشگر

رضا سجودی

بهمن ۱۳۸۸

بسم الله الرحمن الرحيم

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 بی نیاز 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 بی‌همتاست. گواهی از روی اعتقاد و ایمان برآمده از امتحان، و گواهی می‌دهم که محمّد(ص) بندهٔ او و پیامبر اوست. او را بفرستاد با دینی آشکار، و با نشانه‌هایی پدیدار، و قرآنی نبشته در علمِ پروردگار که نوری است رخشان، و چراغی است فروزان، و دستورهایش روشن و عیان تا گَردِ دودلی از دلها بزداید، و با حجّت و دلیل مُلزم 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، وچه 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 به:

فرشتگان پاک آسمان زندگی‌ام

پدر و مادر مهربانم

و همسر فداکارم و عموی شهیدش

پاسداربسیجی

علی اصغر محمودی نژادی

و شهید راه 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 جَلا می‌دهند و طلایه‌دار کاروان بشریت می‌شوند. در ادامهٔ این راه مقدس، لازم می‌دانم که صمیمانه‌ترین سپاس خویش را تقدیم اساتید محترمی نمایم که همواره در تمام دوران تحصیل راهنمایانی بسیار مدبر و بزرگوارانی با محبت بوده‌اند تا بتوانم با مساعدت قلبی و علمی ایشان به این موفقیت دست یابم.

بخصوص سپاس بی‌شائبهٔ 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 جلسهٔ 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 جلسهٔ 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 مسیر یاری 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 آشفتگی ثابت (CPM) از مرتبه بالا برای حل معادلات اشتورم ـ لیوویل و شرودینگر

استاد راهنما
دکترحسین خیری

استاد مشاور
دکتر مهدی صحت خواه

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: ریاضی کاربردی گرایش: آنالیز عددی
دانشکده‌ی علوم ریاضی تاریخ فارغ‌التحصیلی: بهمن ۱۳۸۸ تعداد صفحه: ۳۸۸

کلید واژه‌ها: مسئله اشتورم ـ لیوویل — مسئله شرودینگر — روش‌های آشفتگی — مقدار ویژه — تابع ویژه — تابع پتانسیل

چکیده

روش‌های آشفتگی تکه‌ایی (PPM)، روش‌های خاصی برای حل معادلات اشتورم—لیوویل و شرودینگر در نظریه معادلات دیفرانسیل می‌باشند، بطوریکه این روش‌ها از تکنیک‌های آشفتگی به عنوان ابزاری در جهت ساختار و اصلاح جواب و بهبود آن در مرتبه‌های بالای تقریب استفاده می‌کنند. این روش‌ها بر اساس ایده‌ای که روی هر گام از افرازبندی 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 آشفتگی در جهت اصلاح جواب‌های مرتبه صفرام می‌باشد. موفقیت تقریب وابسته به تأثیر محاسبه جواب‌های مرتبه صفرام و اصلاحات مربوط به آن می‌باشد.
در هر گام از روش‌های آشفتگی تکه‌ایی برای تابع پتانسیل $\bar{V}(x)$ معمولاً دو فرم رایج زیر در جهت تعیین ساختار جواب‌های مرتبه صفرام مورد استفاده قرار می‌گیرد:
۱)تقریب‌های ثابت تکه‌ایی یا روش‌های آشفتگی توابع ثابت (CPM)،

۲)توابع خطی تکه‌ایی یاروش‌های آشفتگی 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 آشفتگی بالا بر اساس جواب‌های مرتبه صفرام می‌باشد. همچنین بررسی‌های عددی بر اساس تأثیر محاسبات و پردازش کامپیوتری CPU بر پایهٔ مدت زمان اجرای هر گام روی یک مرتبه از این روش‌ها ارجحیّت 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. براساس 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 $V(r)=\dfrac{S(r)}{r}+R(r)$ را که در آن $S(r)$ و $R(r)$ توابعی خوش تعریف اند در شرایط ویژه $r\to 0$ و $r\to\infty$ مورد بررسی قرار می‌دهیم.

فهرست مطالب

فهرست جدول‌ها

فهرست شکل‌ها

فهرست الگوریتم‌ها

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

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

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 محدودهٔ فیزیک کلاسیک می‌باشد به همین خاطر این مسائل در فیزیک جدید و مدرن بحث و بررسی می‌شود. همچنین طیف وسیعی از مسائل مهم فیریک 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 متغییرها 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 محقّقین 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_kها نشان دهنده فرکانس سطحkام می‌باشند. سرچشمه این مطالعات از آنجا شروع شد که دانیل برنولی و لئونارداویلر در سال ۱۸۷۷ مسائل ارتعاشات تاری (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 ژزف 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 تکه‌ایی (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 زیر بازه 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 تکه‌ایی 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 ارجحیّت 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 آشفتگی به وسیله قراردادن در جواب تقریب بیان می‌شود، به همین خاطر یک جواب مرتبه صفرام تکه‌ایی 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 آشفتگی 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 لِدوکس 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 برونیابی ریچاردسون در ارتباط با این روش‌ها، روش‌های تغییراتی و تکرار این روش‌ها، روش‌های پرتابی و تبدیلات پروفر آن، روش‌های تقریب ضرایب و روش‌های PPM اشاره کرد. فصل سوم که به عنوان اصلی ترین فصل از این پایان نامه مطرح می‌باشد به ساختارها و خطاهایی در ارتباط با روش‌های آشفتگی ثابت (CPM) ومرتبه‌های بالا آن بر اساس تقریب‌های ثابت تکه‌ایی از تابع پتانسیل مسئله شرودینگر و روش‌های پرتابی و تبدیلات پروفر مربوط به این روش‌ها اشاره شده است. در آخر این 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 آشفتگی 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