



دانشگاه اراک

دانشکده علوم پایه

کارشناسی ارشد ریاضی کاربردی

روش‌های تفاضل متناهی فشرده برای حل معادلات

دیفرانسیل جزئی یک بعدی و دو بعدی

پژوهشگر

غزال قدوسی

استاد راهنما

دکتر بهنام سپهریان

استاد مشاور

دکتر علیمحمد نظری

تابستان 1391

بسم الله الرحمن الرحيم

روش های تفاضل متناهی فشرده برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی یک بعدی و دو بعدی

توسط:

غزال قدوسی

پایان نامه

ارائه شده به مدیریت تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی از فعالیت های
تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد
در رشته ریاضی، گرایش آنالیز عددی

از

دانشگاه اراک

اراک-ایران

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

دکتر بهنام سپهریان (استاد راهنما و رئیس کمیته).....استادیار

دکتر علیمحمد نظری (استاد مشاور).....استادیار

دکتر مهدی تاتاری (داور جلسه).....استادیار

تابستان ۱۳۹۱

تقدیم به پدر عزیزم برای همه حمایت هایش

و

تقدیم به مادرم برای تمام دلسوزی هایش

سپاس‌گزاری...^۱

سپاس خداوندگار حکیم را که به من ارزش، قدرت و انگیزه‌ی بودن داد.
قبل از همه از پدر و مادر و خانواده‌ی خود سپاسگزارم که همواره حامی و مشوقم بوده‌اند
و صبورانه در پیمودن روزهای سخت و آسان زندگی یاریم داده‌اند.
وظیفه‌ی خود می‌دانم که از استاد عزیز و بزرگوالم آقای دکتر بهنام سپهریان که با ارائه
نظرات سازنده و رهنمودهای بی‌دریغشان در پیشبرد این پایان‌نامه سعی تمام مبذول داشتند،
تشکر و قدردانی کنم.
به استاد گرانقدرم آقای دکتر علیمحمد نظری به پاس قدردانی از زحمات بی‌شائبه‌شان،
ادای احترام می‌کنم.
همراهی دوستان عزیزم را در آماده‌سازی این رساله پاس می‌دارم.

غزال قدوسی
تابستان ۱۳۹۱

^۱ ghazaal.ghodoosi@yahoo.com

چکیده

در این پایان نامه به ارائه روش تفاضل متناهی فشرده مرتبه ۴ برای حل عددی معادلات دیفرانسیل پاره‌ای خطی و غیر خطی می‌پردازیم. این معادلات شامل معادله‌ی شرودینگر ۱ بعدی خطی و غیرخطی، معادله‌ی شرودینگر دو بعدی خطی و غیرخطی، معادله‌ی تلگراف و وزش دو بعدی هستند.

برای معادلات دیفرانسیل جزئی ۲ بعدی، به خاطر پرهیز از حل دستگاه‌های با ابعاد بزرگ از روش جهت‌های متناوب استفاده می‌کنیم.

کلیه‌ی روش‌های ارائه شده برای معادلات ۱ بعدی، ۲ بعدی، خطی و غیر خطی، پایدار نامشروط بوده و نرخ همگرایی از مرتبه‌ی $O(\tau^2 + h^4)$ دارند که τ گام زمان و h گام مکان است.

واژگان کلیدی

معادلات دیفرانسیل پاره‌ای، روش تفاضل متناهی فشرده، روش ضمنی جهت‌های متناوب، تخمین خطا.

پیشگفتار

روش‌های مختلفی برای حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی وجود دارد. برخی از این روش‌ها دارای دقت بالایی بوده ولی حجم عملیات آن‌ها ممکن است زیاد باشد. در این جا ما روش تفاضل متناهی فشرده‌ی مرتبه‌ی ۴ را برای حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی تشریح می‌کنیم.

به طور کلی این پایان نامه دارای ۵ فصل است. در فصل اول مفاهیم پایه‌ای و تعاریف و قضایای مقدماتی مورد نیاز آورده شده است. فصل دوم به معرفی معادله‌ی شرودینگر یک بعدی پرداخته و در این فصل به پیاده سازی روش فشرده روی این معادله در ۲ حالت خطی و غیر خطی می‌پردازیم و پایداری حالت خطی و همگرایی حالت خطی و غیر خطی را بررسی می‌کنیم. در فصل سوم روش فشرده جهت‌های متناوب را روی همان معادله شرودینگر دوبعدی در دو حالت خطی و غیر خطی ارائه می‌کنیم. در این فصل نیز به بررسی پایداری روش ارائه شده در حالت خطی و همگرایی آن در حالت غیر خطی می‌پردازیم. فصل چهارم پیاده سازی همان روش جهت‌های متناوب فشرده روی معادله تلگراف می‌باشد که نشان می‌دهیم پایدار نامشروط است.

فصل پنجم پژوهش جدیدی است که در این پایان نامه صورت گرفته و ما به حل معادله‌ی وزش در حالت دو بعدی با روش فشرده جهت‌های متناوب مرتبه‌ی ۴ پرداخته‌ایم. نتایج به دست آمده دقت بالای روش را نشان می‌دهند.

فهرست مطالب

| | | |
|---|---|----|
| ۱ | تعاریف، مفاهیم و قضایای مقدماتی | ۱ |
| ۱ | ۱.۱ روش های تفاضل متناهی فشرده | ۱ |
| ۴ | ۲.۱ تعاریف مقدماتی | ۴ |
| ۵ | ۳.۱ نرم‌ها و ضرب‌های داخلی | ۵ |
| ۲ روش تفاضل متناهی فشرده با مرتبه‌ی دقت بالا برای حل معادله‌ی شرودینگر یک بعدی | | |
| ۷ | ۱.۲ طرح تفاضل متناهی فشرده مرتبه‌ی چهار | ۷ |
| ۱۲ | ۲.۲ برآورد خطا و پایداری | ۱۲ |
| ۱۴ | ۱.۲.۲ پایداری و همگرایی حالت خطی | ۱۴ |
| ۲۱ | ۲.۲.۲ همگرایی حالت غیر خطی | ۲۱ |
| ۲۵ | ۳.۲ پیاده سازی روش و نتایج عددی | ۲۵ |
| ۳ روش فشرده ضمنی جهت‌های متناوب برای معادله‌ی دو بعدی شرودینگر | | |
| ۳۲ | ۱.۳ روش فشرده جهت‌های متناوب برای معادله‌ی شرودینگر خطی | ۳۲ |
| ۳۳ | ۲.۳ روش فشرده جهت‌های متناوب برای معادله‌ی شرودینگر غیر خطی | ۳۳ |
| ۴۰ | ۳.۳ برآورد خطا، پایداری و همگرایی روش | ۴۰ |
| ۴۳ | ۴.۳ نتایج عددی | ۴۳ |
| ۴ طرح تفاضل متناهی فشرده مرتبه‌ی چهار جهت‌های متناوب برای معادله‌ی تلگراف | | |
| ۵۸ | ۱.۴ روش فشرده جهت‌های متناوب برای معادله‌ی تلگراف | ۵۸ |
| ۵۹ | ۲.۴ آنالیز پایداری روش | ۵۹ |
| ۶۶ | ۳.۴ مثال‌ها و نتایج عددی | ۶۶ |

| | | |
|----|-----|--|
| ۷۶ | ۵ | طرح تفاضل متناهی فشرده مرتبه‌ی چهار جهت‌های متناوب برای معادله‌ی وزش |
| ۷۷ | ۱.۵ | روش فشرده جهت‌های متناوب برای معادله‌ی وزش |
| ۸۲ | ۲.۵ | مثال‌ها و نتایج عددی |
| ۸۸ | | مراجع |
| ۹۰ | | واژه‌نامه فارسی به انگلیسی |
| ۹۳ | | واژه‌نامه انگلیسی به فارسی |

فصل ۱

تعاریف، مفاهیم و قضایای مقدماتی

در این فصل مطالبی را که در این پایان نامه به آن نیازمندیم به اختصار توضیح می‌دهیم.

۱.۱ روش‌های تفاضل متناهی فشرده

روش‌های تفاضل متناهی^۱ از سال ۱۹۲۸ تاکنون برای به‌دست آوردن جواب‌های تقریبی معادلات دیفرانسیل معمولی (ODE)^۲ و یا جزئی (PDE)^۳ مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اعمال روش‌های تفاضل متناهی برای حل معادلات دیفرانسیل بدین صورت می‌باشد که ابتدا با گسسته‌سازی دامنه یک ساختار شبکه‌ای منظم به‌دست می‌آوریم، سپس مشتقات موجود در معادله دیفرانسیل را با استفاده از معادله‌ی تفاضلی تقریب می‌زنیم. در هر نقطه از شبکه با مقدار تابع یا مقدار مجهول سروکار داریم، لذا تقریب معادله دیفرانسیل در نهایت به یک دستگاه معادلات خطی یا غیرخطی تبدیل می‌شود که می‌توان آن را با یک الگوریتم مناسب حل کرد. فرایند تقریب معادله دیفرانسیل و دستگاه حاصل، وجه تمایز روش‌های تفاضل متناهی می‌باشد.

یکی از ساده‌ترین روش‌های تفاضل متناهی برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی، استفاده از تقریب مرکزی برای مشتقات جزئی مراتب اول و دوم موجود در معادله است که خطایی از مرتبه $O(h^2)$ دارد که h طول گام نقاط است. روش‌هایی که مرتبه دقت آن‌ها بیشتر از $O(h^2)$ است را روش‌های مرتبه بالا^۴ می‌نامیم.

^۱ Finite Difference Methods

^۲ Ordinary Differential Equation

^۳ Partial Differential Equation

^۴ High-order



شکل ۱.۱: الگوی انتخاب نقاط روش فشرده در حالت یک بعدی

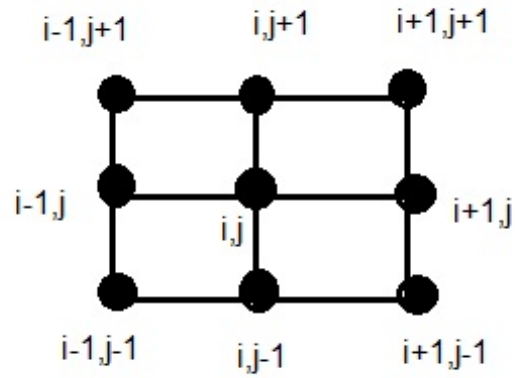
یکی از راه‌هایی که می‌توان با استفاده از آن فرمول تفاضل متناهی با دقت بالا به دست آورد، استفاده از طول گام کوچکتر می‌باشد؛ اما این امر باعث افزایش زمان انجام محاسبات می‌شود. بنابراین برای طول گام ثابت، باید از الگویی با تعداد نقاط بیشتر برای تقریب مشتقات موجود در معادله استفاده کنیم که باعث افزایش پهنای باند ماتریس ضرایب می‌شود و همچنین در نقاط مرزی دچار مشکل می‌شویم. اما با استفاده از روش‌های فشرده^۵ می‌توانیم مرتبه‌ی دقت روش‌ها را به سادگی از ۲ به ۴ افزایش دهیم، بدون این‌که پهنای باند ماتریس ضرایب افزایش یابد.

مجموعه روش‌های فشرده‌ای که در این پایان‌نامه مورد بحث قرار می‌دهیم به دنبال نقاط بیشتری برای تقریب مشتقات موجود در معادله نیست؛ بلکه با تقریب جملات پیشروی خطای برشی، مرتبه‌ی دقت بالاتری به دست می‌آوریم و این تقریب را با مشتق‌گیری از معادله‌ی اصلی و جایگذاری آن در جمله‌ی خطا به دست می‌آوریم. از آن‌جا که ماتریس ضرایب دستگاه حاصل سه قطری است بنابراین حل دستگاه ساده‌تر بوده و به زمان کمتری نیاز دارد. روش‌های فشرده برای طول گام ثابت، از هر روش تفاضل متناهی دیگر خطای کمتری دارند.

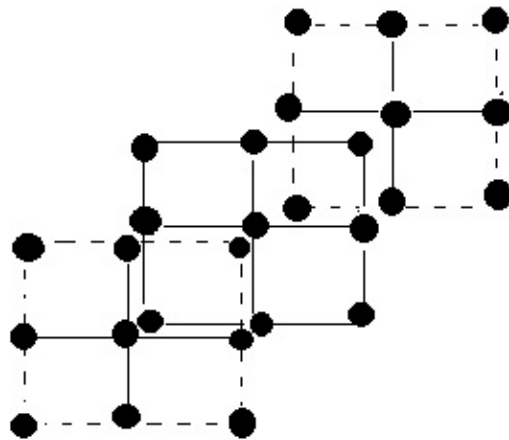
برای به دست آوردن یک الگوی فشرده، مشتقات موجود در معادله دیفرانسیل را در حالت یک بعدی با حداکثر ۳ سه نقطه متوالی، در حالت دوبعدی با حداکثر 3×3 و در حالت سه بعدی با حداکثر $3 \times 3 \times 3$ نقطه به دست می‌آوریم که به ترتیب در شکل‌های ۱.۱، ۲.۱ و ۳.۱ نشان داده شده‌اند.

مزیت‌های روش‌های فشرده مرتبه‌ی بالا علاوه بر افزایش دقت، نیاز به نقاط مجاور کمتر است و این باعث می‌شود که حافظه‌ی کمتر و بنابراین زمان کمتری برای حل مسئله، مورد نیاز باشد.

^۵ Compact Scheme



شکل ۲.۱: الگوی انتخاب نقاط روش فشرده در حالت دو بعدی



شکل ۳.۱: الگوی انتخاب نقاط روش فشرده در حالت سه بعدی

۲.۱ تعاریف مقدماتی

تعریف ۱.۲.۱. (نامساوی گرانوال گسسته^۶) فرض کنید $\{e_j\}_{j=0}^{\infty}$ یک دنباله از اعداد حقیقی نامنفی باشد به طوری که

$$e_{n+1} \leq \alpha + \beta \sum_{j=0}^n e_j \tau, \quad n \geq 0,$$

که $\alpha \geq 0$ و β و τ ثابت‌های مثبت هستند. در این صورت نامساوی زیر را خواهیم داشت

$$e_{n+1} \leq (\alpha + \tau\beta e.)e^{\beta(n+1)\tau}.$$

تعریف ۲.۲.۱. (ضرب داخلی^۷) ضرب داخلی دو بردار $a = [a_1, a_2, \dots, a_n]$ و $b = [b_1, b_2, \dots, b_n]$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^n a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n.$$

برای دو بردار مختلط، ضرب داخلی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^n a_i \bar{b}_i,$$

که \bar{b}_i مزدوج مختلط b_i می‌باشد.

با توجه به مفهوم ضرب داخلی، فضای ضرب داخلی^۸ عبارتست از یک فضای برداری (حقیقی یا مختلط) با ضرب داخلی ای مشخص بر روی آن.

تعریف ۳.۲.۱. (نامساوی شوارتز^۹) برای هر بردار u و v از یک فضای ضرب داخلی داریم

$$|\langle u, v \rangle|^2 \leq \langle u, u \rangle \cdot \langle v, v \rangle,$$

که $\langle 0, 0 \rangle$ ضرب داخلی می‌باشد. با گرفتن ریشه دوم از دو طرف، نامساوی بالا را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \|v\|,$$

که $\| \cdot \|$ همان نرم حاصل از ضرب داخلی است.

^۶ Discrete Gronwall's inequality

^۷ Inner Product

^۸ Inner Product Space

^۹ Schwarz inequality

تعریف ۴.۲.۱. (نامساوی مثلثی^{۱۰}) برای هر بردار u و v از یک فضای برداری نرم‌دار، نامساوی زیر برقرار است

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|.$$

تعریف ۵.۲.۱. (شرط لیب شیتز^{۱۱}) فرض کنید (X, d_X) و (Y, d_Y) دو فضای متریک باشند. گوییم تابع $f : X \rightarrow Y$ در شرط لیب شیتز صدق می‌کند اگر ثابت $K \geq 0$ وجود داشته باشد به طوری که برای هر $x_1, x_2 \in X$ رابطه‌ی زیر برقرار باشد

$$d_Y(f(x_1), f(x_2)) \leq K d_X(x_1, x_2).$$

تعریف ۶.۲.۱. (تابع مطلقا پیوسته) فرض کنید $I \subseteq R$ ، گوییم تابع $f : I \rightarrow R$ مطلقا پیوسته است هرگاه به ازای هر $\epsilon > 0$ عددی مانند $\delta > 0$ وجود داشته باشد به طوری که به ازای هر دنباله از زیر بازه‌های باز جدا از هم (یعنی اشتراک آن‌ها تهی باشد) مانند $\{(a_n, b_n)\}_{n \geq 1}$ که در رابطه‌ی $\sum_{n=1}^{\infty} (b_n - a_n) < \delta$ صدق کنند، داشته باشیم $\sum_{n=1}^{\infty} |f(b_n) - f(a_n)| < \epsilon$.

۳.۱ نرم‌ها و ضرب‌های داخلی

برای تعیین خطای یک روش عددی نرم‌هایی وجود دارد که در زمان ثابت t ، خطا را اندازه گیری می‌کنند. فرض کنید H_h مجموعه توابع شبکه‌ای u تعریف شده روی $I_h = \{x_0, x_1, \dots, x_J\}$ با $u_0 = u_J = 0$ باشد. ضرب‌های داخلی گسسته و نرم‌های زیر را برای مجموعه توابع شبکه‌ای u و w که روی مجموعه گره‌های بازه I_h تعریف شده‌اند، با $u_0 = u_J = w_0 = w_J = 0$ تعریف می‌کنیم:

$$\langle u, w \rangle = \sum_{j=1}^{J-1} u_j \bar{w}_j h, \quad \langle u_x, w_x \rangle_l = \sum_{j=1}^{J-1} (u_j)_x (\bar{w}_j)_x h,$$

$$\|u\|_{L_r} = \sqrt{\langle u, u \rangle}, \quad \|u\|_{L_\infty} = \max_{1 \leq j \leq J-1} |u_j|, \quad \|u_x\|_{L_r} = \sqrt{\langle u_x, u_x \rangle_l},$$

که برای $h = x_i - x_{i-1}$ و $1 \leq i \leq J$ و $(u_j)_x = \frac{u_{j+1} - u_j}{h}$ و \bar{w} مزدوج w است.

فرض کنید $H_h(\Omega_h)$ مجموعه توابع شبکه‌ای v تعریف شده روی $\bar{\Omega}_h$ باشد که $\bar{\Omega}_h = \{(x_i, y_j) | i = 0, \dots, J_x, j = 0, \dots, J_y\}$ و $v_{ij} = 0$ برای $i = 0$ یا J_x و $j = 0$ یا J_y .

^{۱۰}Triangle inequality

^{۱۱}Lipchitz condition

ضرب‌های داخلی گسسته و نرم‌های زیر را روی این مجموعه توابع شبکه‌ای به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \langle v, w \rangle &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} \bar{w}_{ij} h_x h_y, & \langle v, w \rangle_l &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} \bar{w}_{ij} h_x h_y, \\ \langle v, w \rangle_{l_x} &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} \bar{w}_{ij} h_x h_y, & \langle v, w \rangle_{l_y} &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} \bar{w}_{ij} h_x h_y, \\ \|v\| &= \sqrt{\langle v, v \rangle}, & \|v\|_{L_\infty} &= \max_{i,j} |v_{ij}|, & \|v\|_l &= \sqrt{\langle v, v \rangle_l}, \\ \|v\|_x &= \sqrt{\langle v, v \rangle_{l_x}}, & \|v\|_y &= \sqrt{\langle v, v \rangle_{l_y}}, \\ |v|_y^2 &= \|\partial_x v\|_x^2 + \|\partial_y v\|_y^2, & \|v\|_y^2 &= \|v\|^2 + |v|_y^2, \end{aligned}$$

که \bar{w}_{ij} مزدوج-مختلط w_{ij} می‌باشد.

به وضوح برای توابع شبکه‌ای حقیقی مقدار، ضرب‌های داخلی گسسته و نرم‌های بالا به صورت زیر تغییر می‌کنند

$$\begin{aligned} \langle v, w \rangle &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} w_{ij} h_x h_y, & \langle v, w \rangle_l &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} w_{ij} h_x h_y, \\ \langle v, w \rangle_{l_x} &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} w_{ij} h_x h_y, & \langle v, w \rangle_{l_y} &= \sum_{i=1}^{J_x-1} \sum_{j=1}^{J_y-1} v_{ij} w_{ij} h_x h_y, \\ \|v\| &= \sqrt{\langle v, v \rangle}, & \|v\|_{L_\infty} &= \max_{i,j} |v_{ij}|, & \|v\|_l &= \sqrt{\langle v, v \rangle_l}, \\ \|v\|_x &= \sqrt{\langle v, v \rangle_{l_x}}, & \|v\|_y &= \sqrt{\langle v, v \rangle_{l_y}}, \\ |v|_y^2 &= \|\partial_x v\|_x^2 + \|\partial_y v\|_y^2, & \|v\|_y^2 &= \|v\|^2 + |v|_y^2. \end{aligned}$$

فصل ۲

روش تفاضل متناهی فشرده با مرتبه‌ی دقت بالا برای حل معادله‌ی شرودینگر یک بعدی

معادله‌ی شرودینگر^۱ یکی از مسائل مهم در فیزیک کوانتوم بوده و به بررسی حرکت ذرات کوانتومی می‌پردازد. این معادله نوعی تابع موجی است. همانطور که می‌دانیم، معادله‌ی موجی صوتی، تغییرات تراکم هوا را به صورت تابعی از زمان و فاصله به ما می‌دهد. همچنین تابع موجی الکترومغناطیسی، تغییرات شدت میدان الکترومغناطیسی را بر حسب زمان و فاصله نشان می‌دهد. با استفاده از تابع موج می‌توان چگالی احتمال را محاسبه نموده و حرکت ذرات سیستم را مورد بررسی قرار داد.

معادله شرودینگر غیر خطی یکی از معادلات مهم در فیزیک ریاضی می‌باشد و کاربردهای زیادی در زمینه‌های مختلف مانند فیزیک پلاسما، اپتیک‌های غیرخطی، امواج آب و... دارد. اخیراً با مدل‌بندی انتشار غیرخطی پالس در فیبرهای نوری توسط معادله شرودینگر غیرخطی، توجهات روی این معادله افزایش یافته است.

در این فصل دو طرح تفاضل متناهی فشرده را برای حل عددی معادله شرودینگر خطی و غیرخطی یک بعدی ارائه می‌کنیم. برآورد خطا توسط نرم L_2 گسسته نشان می‌دهد که نرخ‌های همگرایی طرح‌های ارائه شده از مرتبه $O(\tau^2 + h^4)$ هستند که τ گام زمان و h گام مکان می‌باشد. در آخر مثال‌های عددی را برای نشان دادن مرتبه دقت بالای روش ارائه می‌دهیم.

^۱ Schrodinger

۱.۲ طرح تفاضل متناهی فشرده مرتبه‌ی چهار

مسأله مقدار مرزی-اولیه زیر را از معادله شرودینگر غیرخطی یک بعدی در نظر می‌گیریم:

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q|u|^p u = 0, \quad x \in R, \quad t \geq 0, \quad (1.2)$$

$$u(x, 0) = \phi(x),$$

که $i = \sqrt{-1}$, $q \geq 0$, $p > 0$, $\eta \neq 0$ ثابت‌های حقیقی هستند و $u = u(x, t)$ یک تابع مختلط مقدار و ϕ یک تابع مشتق‌پذیر معلوم می‌باشد که زمانی که $|x|$ به بی‌نهایت میل کند به صورت نمایی کاهش می‌یابد.

در مسأله (۱.۲) فرض می‌کنیم که $x \in I = [a, b]$, $t \in [0, T]$. برای اینکه شرط $u \rightarrow 0$ زمانی که $|x| \rightarrow \infty$ برقرار باشد می‌توان شرایط مرزی ساختگی $u(a, t) = u(b, t) = 0$ فرض نمود.

تحت این مفروضات مسأله (۱.۲) به مسأله زیر تبدیل می‌شود.

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q|u|^p u = 0, \quad a < x < b, \quad 0 < t \leq T, \quad (2.2)$$

$$u(x, 0) = \phi(x), \quad a < x < b$$

$$u(a, t) = u(b, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T$$

دامنه جواب Ω به صورت $\Omega = \{(x, t) \mid a \leq x \leq b, 0 \leq t \leq T\}$ را به شبکه‌هایی با مجموعه گره‌های $\{(x_j, t_n)\}$ گسسته سازی می‌کنیم که $x_j = a + jh$, $j = 0, \dots, J$ و $t_n = n\tau$ و $n = 0, 1, \dots, N = \frac{T}{\tau}$ که h و τ پارامترهای گسسته‌سازی هستند.

در این جا برای سادگی انواع مشتقات مراتب مختلف تابع u را که در حین روند از آن‌ها استفاده می‌کنیم، با عملگرهایی به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$(u_j)_x^n = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h}, \quad (u_j)_{\bar{x}}^n = \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h}, \quad (u_j)_t^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau},$$

$$(u_j)_t^{n+1} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\tau}, \quad (u_j)_{\bar{x}\bar{x}}^n = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2},$$

و همچنین قرار می‌دهیم

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_j^{n+1} + u_j^n).$$

با در نظر گرفتن

$$\nu = \eta \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}}, \quad (3.2)$$

معادله شرودینگر غیر خطی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\nu = -i \frac{\partial u}{\partial t} - q|u|^p u. \quad (4.2)$$

با گسسته سازی (۴.۲) در نقطه $(x_j, t_{n+\frac{1}{\nu}})$ خواهیم داشت:

$$\nu_j^{n+\frac{1}{\nu}} = -i \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} - q(|u|^p)_j^{n+\frac{1}{\nu}} u_j^{n+\frac{1}{\nu}}. \quad (5.2)$$

با توجه به اینکه تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه اول u نسبت به t در نقطه $(x_j, t_{n+\frac{1}{\nu}})$ به صورت

$$(u_j)_{\hat{t}}^{n+\frac{1}{\nu}} = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} + O(\tau^2),$$

است و از طرفی $(u_j)_{\hat{t}}^{n+\frac{1}{\nu}} = (u_j)_t^n$ ، پس با جایگذاری این روابط در (۵.۲) به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\nu_j^{n+\frac{1}{\nu}} = -i(u_j)_t^n - q(|u|^p)_j^{n+\frac{1}{\nu}} u_j^{n+\frac{1}{\nu}} + O(\tau^2). \quad (6.2)$$

از طرف دیگر از رابطه‌ی (۳.۲) داریم

$$\nu_j^{n+\frac{1}{\nu}} = \eta \left(\frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \right)_j^{n+\frac{1}{\nu}}.$$

با نوشتن تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه دوم u نسبت به x در نقطه $(x_j, t_{n+\frac{1}{\nu}})$ داریم:

$$(u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{\nu}} = \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} + \frac{h^{\nu}}{12} \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} + O(h^{\nu}).$$

پس

$$\eta \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} = \eta (u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{\nu}} - \eta \frac{h^{\nu}}{12} \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} + O(h^{\nu}) = \eta (u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{\nu}} - \frac{h^{\nu}}{12} \frac{\partial^{\nu} \nu}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} + O(h^{\nu}).$$

یکبار دیگر با نوشتن تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه دوم ν نسبت به x خواهیم داشت:

$$\nu_j^{n+\frac{1}{\nu}} = \eta \frac{\partial^{\nu} u}{\partial x^{\nu}} \Big|_j^{n+\frac{1}{\nu}} = \eta (u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{\nu}} - \frac{h^{\nu}}{12} (\nu_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{\nu}} + O(h^{\nu}). \quad (7.2)$$

با مقایسه (۶.۲) و (۷.۲) داریم:

$$i(u_j)_t^n + q(|u^p)_j^{n+\frac{1}{2}} u_j^{n+\frac{1}{2}} + \eta(u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}(\nu_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} - 2\nu_j^{n+\frac{1}{2}} + \nu_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}) = O(\tau^2 + h^4). \quad (۸.۲)$$

با جایگذاری (۶.۲) در (۸.۲) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{12}[(u_{j-1})_t^n + 10(u_j)_t^n + (u_{j+1})_t^n] + \eta(u_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{q}{12}[(|u^p)_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} u_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} + \\ & 10(|u^p)_j^{n+\frac{1}{2}} u_j^{n+\frac{1}{2}} + (|u^p)_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} u_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}] = O(\tau^2 + h^4). \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن U_j^n به عنوان تقریب‌هایی از u_j^n طرح تفاضل متناهی فشرده‌ی ضمنی زیر را برای مسأله (۲.۲) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{12}[(U_{j-1})_t^n + 10(U_j)_t^n + (U_{j+1})_t^n] + \eta(U_j)_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{q}{12}[(|U^p)_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} U_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} + \\ & 10(|U^p)_j^{n+\frac{1}{2}} U_j^{n+\frac{1}{2}} + (|U^p)_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} U_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}] = 0, \quad 1 \leq j \leq J-1 \\ & U_0^n = U_J^n = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N \\ & U_j = \phi(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, J \end{aligned} \quad (۹.۲)$$

(۹.۲) غیرخطی است و بنابراین یک الگوریتم تکراری برای حل آن باید استفاده شود. برای رفع این مشکل ما یک طرح تفاضل متناهی فشرده ضمنی و خطی را برای مسأله (۲.۲) به صورت زیر ارائه می‌دهیم.

اگر (۴.۲) را در نقطه (x_j, t_n) گسسته سازی کنیم خواهیم داشت:

$$\nu_j^n = -i \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n - q(|u^p)_j^n u_j^n. \quad (۱۰.۲)$$

با توجه به این که تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه اول u نسبت به t در نقطه (x_j, t_n) به صورت

$$(u_j)_t^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\tau} = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n + O(\tau^2),$$

است، پس با جایگذاری $(u_j)_t^n + O(\tau^2)$ به جای $\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_j^n$ در (۱۰.۲) خواهیم داشت:

$$\nu_j^n = -i(u_j)_t^n - q(|u^p)_j^n u_j^n + O(\tau^2). \quad (۱۱.۲)$$

از طرفی دوباره از (۳.۲) داریم

$$\nu_j^n = \eta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_j^n.$$

دوباره مانند قبل یکبار با نوشتن تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه دوم u نسبت به x در نقطه (x_j, t_n) و یک بار با نوشتن تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه دوم ν نسبت به x در نقطه (x_j, t_n) به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\nu_j^n = \eta (u_j)_{x\bar{x}}^n - \frac{h^2}{12} (\nu_j)_{x\bar{x}}^n + O(h^4). \quad (۱۲.۲)$$

با مقایسه و جایگذاری (۱۱.۲) در (۱۲.۲) و قرار دادن $\frac{u_j^{n+1} + u_j^{n-1}}{2}$ به جای u_j^n و در نظر گرفتن U_j^n به عنوان تقریب‌هایی از u_j^n به طرح تفاضل متناهی فشرده زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{12} [(U_{j-1})_{\bar{t}}^n + 10(U_j)_{\bar{t}}^n + (U_{j+1})_{\bar{t}}^n] + \frac{\eta}{2} [(U_j)_{x\bar{x}}^{n+1} + (U_j)_{x\bar{x}}^{n-1}] + \frac{q}{24} (|U|^p)_{j-1}^n [U_{j-1}^{n+1} + \\ & U_{j-1}^{n-1}] + \frac{10q}{24} (|U|^p)_j^n [U_j^{n+1} + U_j^{n-1}] + \frac{q}{24} (|U|^p)_{j+1}^n [U_{j+1}^{n+1} + U_{j+1}^{n-1}] = 0, \\ & 1 \leq j \leq J-1 \end{aligned} \quad (۱۳.۲)$$

$$U_j^n = U_j^n = 0, \quad n = 0, 1, \dots, N$$

$$U_j^0 = \phi(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, J$$

(۱۳.۲) خطی است و بنابراین پیاده‌سازی آن آسان‌تر است. چون (۱۳.۲) سه گامه است پس برای شروع با استفاده از (۱۳.۲) ما باید U^1 را داشته باشیم. پس ابتدا با استفاده از یک الگوریتم تکراری خطی به کار رفته در (۹.۲)، U^1 را به دست آورده و سپس U^n را برای $n \geq 2$ از (۱۳.۲) به دست می‌آوریم. (۹.۲) و (۱۳.۲) هر دو خطای برشی از مرتبه $O(\tau^2 + h^4)$ دارند.

۲.۲ برآورد خطا و پایداری

در این قسمت ابتدا لم‌های زیر را برای نرم‌ها و ضرب‌های داخلی بیان شده برای تابع یک متغیره‌ی u در فصل اول، بیان و اثبات می‌کنیم.

لم ۱.۲.۲: برای هر تابع شبکه‌ای u و w تعریف شده روی I می‌توان رابطه‌ی زیر را به‌دست آورد

$$(u_{x\bar{x}}, w) = -(u_x, w_x)_I.$$

اثبات:

$$(u_{x\bar{x}}, w) = \sum_{j=1}^{J-1} ((u_j)_x - (u_{j-1})_x) \frac{\bar{w}_j}{h} h = - \sum_{j=0}^{J-1} (u_j)_x (\bar{w}_j)_x h = -(u_x, w_x)_I.$$

توجه کنید که $w_0 = w_J = 0$.

لم ۲.۲.۲: برای هر تابع شبکه‌ای u تعریف شده روی I رابطه‌ی زیر برقرار است

$$\| \|u_x\| \|_{L^r} \leq \frac{4}{h^2} \|u\|_{L^r}^2.$$

اثبات:

$$\begin{aligned} \| \|u_x\| \|_{L^r} &= \frac{1}{h^2} \sum_{j=0}^{J-1} (u_{j+1} - u_j)(\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_j) h \leq \frac{1}{h^2} \sum_{j=0}^{J-1} (|u_{j+1}|^2 + 2|u_j||u_{j+1}| + |u_j|^2) h \\ &\leq \frac{2}{h^2} \sum_{j=0}^{J-1} (|u_{j+1}|^2 + |u_j|^2) h = \frac{4}{h^2} \|u\|_{L^r}^2. \end{aligned}$$

توجه کنید که $u_0 = u_J = 0$.

لم ۳.۲.۲: برای هر تابع شبکه‌ای u تعریف شده روی I نامساوی زیر را داریم:

$$\|u\|_{L^\infty} \leq \frac{\sqrt{b-a}}{2} \| \|u_x\| \|_{L^r}.$$

اثبات: برای هر $k, 1 \leq k \leq J-1$ ، رابطه‌ی زیر برقرار است