بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

گرایش نظری

عنوان : روش تکرار مجانبی (AIM) در حل بعضی از سیستم‌های کوانتومی

سید روح‌اله عزیزیان

استاد راهنما : دکتر حسین پناهی

بهمن ماه ۱۳۹۳

تقدیم به پدر، مادر و همسرم

سپاسگزاری

از استاد بزرگوارم آقای دکتر پناهی که در تمام مراحل انجام این پایان نامه بنده را یاری کردند و بی شک بدون یاری ایشان این کار انجام نمی‌شد، کمال قدردانی و تشکر را دارم.

فهرست مطالب

فهرست جدول‌ها

فهرست تصاویر

چکیده

عنوان: روش تکرار مجانبی (AIM) در حل بعضی از سیستم‌های کوانتومی

نام دانشجو: سیدروح‌اله عزیزیان

در این پایان نامه سیستم های کوانتومی که به معادله دیفرانسیل مرتبه دوم همگن منجر می شوند را بررسی می کنیم. ابتدا روش تکرار مجانبی (AIM) را معرفی نموده و از آن برای حل پتانسیل‌های کوانتومی استفاده می‌کنیم. پتانسیل‌های کوانتومی حل‌پذیر غیرنسبیتی مانند پتانسیل گلدمن-کریچنکوف، مربع تانژانت، پتانسیل مختلط کتانژانت برای معادله شرودینگر حل شده و سپس برای معادله دیراک پتانسیل برداری کولنی و پتانسیل DF با برهمکنش تانسوری در تقارن شبه اسپین را بررسی کرده‌ایم. بعد از آن چند مسئله غیرحل‌پذیر شامل پتانسیل‌های مربع سینوس، دو کسینوسی و یک پتانسیل شعاعی خاص، که خود شامل پتانسیل‌های گوناگونی است، به وسیله روش عددی تکرار مجانبی مطالعه شده است. همچنین مسئله شبه حل‌پذیر پتانسیل متیو حل شده است. نتایج حاصل از این روش در بعضی از مسائل با جواب‌های روش‌های دیگر مقایسه شده است.

کلید واژه:

روش تکرار مجانبی ، معادله دیراک ، معادله شرودینگر ، توابع فوق هندسی ، سیستم‌های کوانتومی ، معادله دیفرانسیل خطی همگن مرتبه دوم

Abstract

Title: Asymptotic iteration method for solving some quantum systems

Name: Seyed Roholah Azizian

In this thesis, we consider the quantum systems which yield to the homogenous second order differential equation. We first introduce the asymptotic iteration method (AIM) and use the AIM method for solving of quantum potentials. The nonrelativistic solvable quantum potentials such as Gol'dman-Krichenkov, tangent squared, complex cotangent potentials are solved for Schrodinger equation and then for Dirac equation, we study the Columb vector potential and DF potential with tensor interaction in psudospin symmetry. After that some of the nonsolvable problems, including Sine-squared, double cosine potentials and a special radial potential which includes various potentials, are studied by numerical asymptotic iteration method. Also, we solve the quasi-exact Mathieu potential. In some problems we compare the results of this method with other methods.

Key words: Asymptotic iteration method, Dirac equation, Schorodinger equation, Hypergeometric functions, Homogenous linear second order differential equation

فصل اول

پیشگفتار

یک معادله دیفرانسیل رابطه‌ای است میان یک تابع و مشتقات آن، و از آنجایی که در بیشتر مسائل فیزیکی با رابطه میان آهنگ تغییر کمیت‌ها و خود کمیت سر و کار داریم ، معادلات دیفرانسیل از دیر باز دارای اهمیت به سزایی در فیزیک بوده است. پیشینه تاریخی معادلات دیفرانسیل به ابداع حساب دیفرانسیل وانتگرال توسط نیوتن (۱۶۴۲-۱۷۲۷م) فیزیکدان بریتانیایی، زمانی که بیست و سه سال بیشتر نداشت، بازمی‌گردد. در همین زمان لایب نیتس(۱۶۴۶-۱۷۱۶م)، ریاضیدان برجسته‌ی آلمانی، نیز مستقلا حساب دیفرانسیل و انتگرال را کشف کرد. قانون دوم نیوتن برای توصیف حرکت یک ذره در واقع یک معادله دیفرانسیل است. معادلات ماکسول یک دستگاه معادلات دیفرانسیل با مشتقات پاره‌ای هستند که به همراه قانون نیروی لورنتس اساس الکترومغناطیس کلاسیک و اپتیک کلاسیک را تشکیل می‌دهند.در نظریه نسبیت عام معادله میدان انیشتین یک دستگاه از ده معادله پاره‌ای است که گرانش را به صورت خمش فضا-زمان به وسیله ماده و انرژی توصیف می‌کند. در مکانیک کوانتوم نیز معادله شرودینگر یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی می‌باشد که برای توصیف جهان زیر اتمی و بیان تغییرات زمانی یک تابع حالت به کار می‌رود همچنین در کوانتوم مکانیک نسبیتی معادلات کلاین-گوردون و دیراک هردو معادله‌ای دیفرانسیلی می‌باشند. از دیگر معادلات مهم در فیزیک معادله اویلر لاگرانژ در مکانیک، معادله هامیلتونی ، معادله لاپلاس ، معادله ناویه استوکس در مکانیک سیالات و بسیاری معادلات معروف دیگر در فیزیک همگی نشان از اهمیت معادلات دیفرانسیل در فیزیک دارند.

بیشتر معادلات دیفرانسیلی که نام بردیم به ویژه معادله مستقل از زمان شرودینگر به شکل معادله دیفرانسیل خطی همگن مرتبه دوم ،به شکل کلی $f''(x) = p(x)f'(x) + q(x)f(x)$ ، می‌باشند که موضوع بحث این پایان نامه است. همچنین معادله دیراک برای ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ در مکانیک کوانتوم نسبیتی را که به صورت دو معادله خطی مرتبه اول است با کمی عملیات ریاضی می‌توان به شکل معادله دیفرانسیل خطی همگن مرتبه دوم نوشت. شمار محدودی از معادلات به این فرم را می‌توان به صورت تحلیلی حل کرد که از جمله این معادلات می‌توان معادله هرمیت، معادله اویلر،معادله بسل، معادله فوکر-پلانک[1]، معادله چبیشف[2]، معادله لاگرانژ و معادله فوق هندسی گوس را نام برد که به این نوع معادلات دیفرانسیل معادلات حل‌پذیر می‌گوییم. معادلات شرودینگر و دیراک به ازای پتانسیل‌های خاصی به این معادلات حل‌پذیر تبدیل می‌شوند و در بیشتر حالت‌ها با معادلاتی سر و کار داریم که حل‌تحلیلی ندارند برای این دسته از معادلات از روش‌های تقریبی و یا روش‌های عددی استفاده می‌شود. در مسائل ویژه مقداری علاوه بر یافتن جواب‌ها یافتن ویژه مقدار مربوط به آن نیز اهمیت دارد. در دهه اخیر دسته دیگری از پتانسیل ها معرفی شده‌اند که معادله شرودینگر با آنها چیزی میان مسائل حل پذیر و غیرحل‌پذیر می‌شود که به این دسته پتانسیل‌ها پتانسیل‌های شبه حل‌پذیر گفته می‌شود[۱]. به این معنی که طیف انرژی و تابع موج‌های آن تا تعداد محدودی به صورت تحلیلی و با روش‌های جبری قابل محاسبه هستند. امروزه این دسته پتانسیل‌ها بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند.[۲-۸] دسته بندی کامل این پتانسیل‌ها توسط توربینر[3] در ده کلاس انجام گرفته است[۳-۴].

تا کنون راه‌ها و روش‌های زیادی برای حل معادلات دیفرانسیل ابداع شده و همواره ابداع روشی جدید و مقایسه روش‌ها و نتایج حاصل از روش‌های مختلف مورد توجه و علاقه‌ی دانشمندان بوده و هست. از جمله روش‌هایی که برای حل معادلات دیفرانسیل حل‌پذیر وجود دارد می توان به چند روشی که در ادامه می‌آوریم اشاره کرد. در اینجا تنها ایده و فرایند کلی این روش‌ها را صرفا جهت دیدی کلی بیان می‌کنیم. روش کاهش مرتبه که به طور مثال برای معادله دیفرانسیل همگن مرتبه دوم با دانستن یکی از جواب‌های معادله دیفرانسیل می‌توان مرتبه آن را به یک کاهش داد. روش متداول دیگر استفاده از سری های نامتناهی است که با جا گذاری در معادله دیفرانسیل خطی به یک رابطه بازگشتی برای ضرایب سری بدست می‌آید که با حل آن جواب

[1] Fokker-Planck equation

[2] Chebyshev equation

[3] Turbiner

معـادلـه دیفرانســـیل را می‌یابیم. روش فاکتورگیری[۱] [۱۲]، که با تجزیه و فاکتورگیری از یک معادله دیفرانســـیل به شـــکل حاصـل‌ضـرب عملگرهای نردبانی و پیدا کردن ویژه مقادیر عملگرهای نردبانی مسـئله را حل کرد. روش دیگر روش تصویر[۱۳] اسـت که بیشـتر در مسـائل الکترومغناطیس کاربرد دارد. ایده این روش این اسـت که اگر ما جواب یک مسئله را در حالت آزاد بدانیم یعنی بتوانیم مسـئله را بدون در نظر گرفتن شـرایط مرزی آن حل کنیم آنگاه جواب حالت‌های دارای شـرایط مرزی، به شـرط آنکه مرزها همگن باشـند، را می‌توان با انطباق دادن حالت‌های تصـویری بدسـت آورد. روش جبر لی که با یافتن گروه تبدیلی که تحت آن معادله دیفرانسیل ناوردا بماند به اطلاعاتی به ناوردایی‌ها و تقارن‌های معادله دیفرانسیل می‌انجامد که گاهی می‌تواند منجر به حل معادله دیفرانسیل گردد.از روش‌های دیگر می‌توان به روش NU[۲] [۱۴]اشاره کرد.

برای حل معادلات غیر حل پذیر نیز راه های بسـیاری ابداع شـده اسـت که به دو دسـته روش های عددی و روش‌های تقریبی هســتنـد. از جملـه روش‌هـای تقریبی می توان روش‌های تحلیل نموداری[۳]، روش ترتیبی[۴]، روش نیوتن، روش اختلال و روش WKB اشـاره کرد. از جمله روش‌های عددی نیز می‌توان به روش پیشـرو اویلر[۵]، روش عنصر محدود[۶]، روش رانگ کوتا[۷] ، روش هیبرید[۸] و بسیاری روش‌های دیگر که می‌توان آنها را در مراجع [۱۵] یافت.

روش تکرار مجانبی[۹] روشـی جالب برای حل معادلات دیفرانسـیل خطی همگن مرتبه دوم و در به دست آوردن ویژه مقادیر آن اسـت که توسـط سیفتسی[۱۰] و همکارانش ابداع شده [۱۶] و در سال های اخیر مسائل بسیاری در زمینه های مختلف فیزیک با اسـتفاده از آن مورد مطالعه قرار گرفته اسـت. به طور مثال در اختر فیزیک چو[۱۱] و همکارانش با استفاده از این روش به بررسی حالت های شـبه نرمال سـیاه چاله ها[۱۲] پرداخته اند[۱۷] ، در فیزیک ماده چگال مسائل متعددی بررسی شده که به طور نمونه می توان به کار سـویلو[۱۳] و همکارانش در حل هیدروژن دهنده[۱۴] در میدان مغناطیسـی[۱۸] اشـاره کرد. این روش در فیزیک هسـته ای نیز در حل مسـائل بسیاری بکار رفته است به ویژه در حل معادله دیراک و کلاین گوردن تحت تقارن های اسپینی و شـبه اسـپینی[۱۵] برای پتانسـیل های مختلف[۱۹-۲۱] استفاده شده است. علاوه بر این می توان به حل پتانسیل های گوناگون برای معادله شـرودینگر و معادله دیراک مانند پتانسـیل های وودساکسون[۱۶][۲۲] ، هلتن[۱۷] [۲۳و۲۸] ، اکارت[۱۸] [۲۴]، پاشل تلر مثلثاتی[۱۹][۲۵] ، مورس[۲۰][۲۶-۲۷] و رابطه ی دافین کمر پیتو[۲۱] [۲۸] و بسـیاری مسـائل دیگر که با روش تکرار مجانبی مورد بررسـی قرار گرفته اسـت اشـاره کرد. روش تکرار مجانبی الگوریتمی تقریبا مشـابه برای هر دو دسـته مسـائل حل‌پذیر و غیر حل‌پذیر معرفی کرده است که به صورت تکرار شونده در هر تکرار ویژه مقدار و ویژه تابع آن بدست می‌آید.

در فصـــل دوم این پایان نامه ابتدا به معرفی و اثبات روش تکرار مجانبی و نحوه به کار بردن آن برای مســـائل حل پذیر و غیر حل‌پذیر خواهیم پرداخت و همچنین نشـــان خواهیم داد که چگونه این روش را برای دو معادله دیفرانســـیل خطی مرتبه اول

---

۱ Factorization Method
۲ Nikiforov-Uvarof Method
۳ Graphical Analysis
۴ Collocation Method
۵ Euler's Forward Method
۶ Finite Element Method
۷ Runge-Kutta Methods
۸ Hybrid Methods
۹ Asymptotic Iteration Method
۱۰ Ciftci
۱۱ T.Cho
۱۲ Black hole quasinormal modes
۱۳ Soylu
۱۴ Hydrogenic donor
۱۵ Spin and Pesudospin symmetry
۱۶ Woods-Saxon
۱۷ Hulthen
۱۸ Eckart
۱۹ Trigonometric Poschel-teller
۲۰ Morse
۲۱ Duffin-Kemmer-Patiue equation

کوپل شده، بدون اینکه نیاز باشد آنها را با هم ترکیب کنیم، به کار ببریم. سپس به معرفی معادله دیراک که مهمترین معادله در کوانتوم نسبیتی است می‌پردازیم و فرم آن را برای پتانسیل‌های شعاعی برداری و اسکالر و تحت برهم‌کنش تانسوری بدست می‌آوریم. در پایان فصل هم به معرفی معادله گوس و تعمیم آن یعنی توابع فوق هندسی می‌پردازیم که کاربرد بسیاری در فصل سوم خواهد داشت. ما با استفاده از توابع فوق هندسی چند جمله‌ای‌ها را به صورت تابعی کلی خواهیم نوشت.

در فصل سوم، شش مسئله حل پذیر را بررسی کرده‌ایم ابتدا در مثالی کاملا ریاضی معادله گوس را بررسی کرده‌ایم. سپس به حل چند پتانسیل در معادله شرودینگر پرداخته‌ایم . ابتدا هامیلتونین گلدمن و کریچنکوف که در واقع تعمیم هامیلتونین نوسانگر هماهنگ در سه بعد است حل کرده سپس در مسئله‌ای با پتانسیل مثلثاتی پتانسیل مربع تانژانت (که پتانسیل پاشل تلر نیز نامیده می‌شود) را بررسی کرده‌ایم پیش از این تاسلی[۱] مطالعه‌ای در مورد پتانسیل مربع تانژانت $V(x) = v(v-1)\tan^2(x)$ با شرط $x \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ انجام داده[۲۹] که در آن تنها ویژه مقادیر مورد بررسی واقع شده و توابع موج مطرح نگردیده است. بررسی کاملا مشابهی نیز توسط مارمارینو[۲] [۳۰] در مورد پتانسیل کتانژانت $V(x) = v(v-1)\tan^2(x)$ در بازه‌ی نامتقارن $x \in (-0, \pi)$ صورت پذیرفته که با رابطه مثلثاتی ساده‌ی $\tan\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = -\cot(x)$ به همین مسئله تبدیل می‌شود. سپس پتانسیل مختلط کتانژانت که یک نمونه پتانسیل مثلثاتی با ضریب مختلط است را بررسی نموده‌ایم قابل ذکر است که این نوع پتانسیل ها به دلیل مختلط بودن هامیلتونی را غیر هرمیتی می‌کنند ولی از آن جایی که منجر به معادله دیفرانسیلی حل‌پذیر می‌شوند مورد توجه هستند. در بخش بعدی این فصل به حل دو پتانسیل خاص برای معادله دیراک می‌پردازیم ابتدا پتانسیل برداری کولنی معادله دیراک را با روش تکرار مجانبی برای دو معادله کوپل شده حل می‌کنیم و سپس در مسئله ای پیچیده تر معادله دیراک با پتانسیل DF[۳] به همراه برهمکنش تانسوری در تقارن شبه اسپینی بررسی خواهیم نمود. رابطه بین تقارن شبه اسپین[۴] و معادله دیراک توسط گینوچیو[۵] بیان شده است[۳۱]. او نشان داده است که در حضور پتانسیل برداری $V(r)$ و پتانسیل اسکالر $S(r)$، که در بخش (۲-۲) معرفی شدند، تقارن شبه اسپین زمانی رخ می‌دهد که $\Sigma(r) \equiv S(r) + V(r) = 0$ شود. از طرفی تقارن اسپینی، که مربوط به مزون‌ها است، در معادله زمانی رخ می‌دهد که $\Delta(r) \equiv V(r) - S(r) = 0$ شود[۳۱-۳۳]. پس از آن منگ و همکارانش نشان دادند که تقارن شبه اسپینی تحت شرایط کلی‌تر $\Sigma(r) \equiv S(r) + V(r) = c$ ، که در آن c یک عدد ثابت است، رخ می‌دهد و یا به بیان دیگر تقارن شبه اسپینی زمانی رخ می‌دهد که $\frac{d\Sigma(r)}{dr} = 0$ باشد. به همین ترتیب شرایط تقارن اسپینی در حالت کلی‌تر $\Delta(r) \equiv V(r) - S(r) = c$ یا $\frac{d\Delta(r)}{dr} = 0$ است. بنابراین حل معادله دیراک تحت تقارن اسپین و شبه اسپین با پتانسیل‌های مختلف بسیار مورد توجه بوده است و همچنین برهمکنش تانسوری روی تقارن‌های شبه اسپین و اسپین بسیار مطالعه شده است[۱۹-۲۱]. در تمام مسائل این فصل روابطی که برای ویژه توابع بدست می‌آوریم را با استفاده از روابط فوق هندسی به صورت روابطی کلی خواهیم نوشت.

در فصل چهارم به مسائلی پرداخته‌ایم که حل تحلیلی ندارند. ابتدا برای معادله شرودینگر پتانسیل‌ها مثلثاتی مربع سینوس و پتانسیل دو کسینوسی را بررسی نموده‌ایم. پتانسیل $\mathbf{V(r)} = \frac{\mathbf{A}}{\mathbf{r^2}} - \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{r}} + \mathbf{Cr^s}$ در معادله‌ی شرودینگر مسئله بعدی ایست که مورد مطالعه قرار داده‌ایم. این پتانسیل به ازای پارامترهای مختلف، پتانسیل‌های گوناگونی را در بر می‌گیرد، برای $C = 0$ پتانسیل کراتزر[۶] حاصل می‌شود که برای توصیف ساختار مولکولی و اندرکنش‌های آن استفاده می‌گردد که تا کنون به

---

[۱] Taseli

[۲] marmarino

[۳] Deng-Fan Potential

[۴] Pseudospin symmetry

[۵] Ginochio

[۶] Kratzer potential

روش‌های مختلفی به صورت تحلیلی حل شده است[۳۵-۳۷]. در حالت $s = 2$ ، $B = 0$ و $A \neq 0$ پتانسیل گلدمن-کریچنکوف[۱] حاصل می‌گردد که این پتانسیل نیز با روش‌های متفاوتی مورد مطاله قرار گرفته است[۳۶و۳۸]، حالت خاص این پتانسیل، نوسانگر هماهنگ تیز شده[۲] است که با $s = 2$ ، $B = 1$ و $A = 0$، بدست می‌آید. برای $s = 1$ و $A = 0$ پتانسیل کولنی[۳] به اضافه پتانسیل خطی بدست می‌آید که با روش‌هایی همچون پوششی[۴] و وردش[۵] حل شده است[۳۸]، این پتانسیل کاربرد زیادی در فیزیک اتمی و مولکولی دارد[۳۹]. برای $s = 2$ و $A = 0$ پتانسیل کولنی به اضافه نوسانگر هماهنگ حاصل می‌شود. این شکل پتانسیل با روش تکانه[۶] [۴۰] ، روش بسط $\frac{1}{N}$ انتقال یافته[۷][۴۱] و روش پوششی[۳۸] حل شده است. همچنین این پتانسیل برای آزمودن اثر زیمان مرتبه دوم[۸] بکار می‌رود[۴۲]. در قسمت بعد از فصل چهارم یک نمونه پتانسیل شبه حل پذیر که پیشتر آن را معرفی کردیم بررسی کرده و جواب‌های آن را با نتایج حاصل از روش جبر لی مقایسه نموده‌ایم. این پتانسیل شبه‌حل پذیر پتانسیل متیو است که در کلاس بندی توربینور در کلاس x قرار می‌گیرد[۳-۴]. در پایان نیز به عنوان مسئله ای از مکانیک کوانتوم نسبیتی معادله دیراک را تحت پتانسیل برداری $V(r) = -\frac{A}{r} + B_1 r$، یعنی یک جمله کولنی به اضافه جمله خطی به همراه پتانسیل اسکالر خطی به صورت $S(r) = B_2 r$ حل خواهیم کرد.

در فصل پنجم هم به نتیجه گیری و ارائه پیشنهادهایی خواهیم پرداخت. در دو پیوست مجزا هم نمونه‌هایی از کد الگوریتم روش تکرار مجانبی برای هر دو حالت مسائل حل‌پذیر و غیر حل پذیر به زبان Maple آورده شده است.

---

[۱] Gol'dman-Krichenkov

[۲] Spiked harmonic oscillator potential

[۳] Coulomb potential

[۴] Envelope method

[۵] Variation method

[۶] Moment method

[۷] Shifted $\frac{1}{N}$ expansion method

[۸] Zeeman quadratic effect

فصل دوم

مفاهیم پایه

۲-۱ روش تکرار مجانبی

۲-۱-۱ مقدمه

معادلات دیفرانسیل همگن مرتبه دوم را به طور کلی می توان به دو دسته تقسیم کرد ، دسته اول معادلاتی که می توان برای آنها جوابی تحلیلی یافت که به اصطلاح معادلات حل پذیر نامیده می شوند ، در مقابل دسته دیگر معادلاتی هستند که دارای جواب تحلیلی نمی باشند و برای حل آنها یا باید از روش های تقریبی و یا روش های عددی استفاده کرد که به اصطلاح به این دسته معادلات غیر حل پذیر یا معادلات با حل غیر دقیق می گوییم. روش تکرار مجانبی برای هر دو دسته این معادلات راه حلی را ارائه کرده است که در مورد مسائل غیر حل پذیر تنها می توان ویژه مقادیر را به روشی عددی بدست آورد.

۲-۱-۲ روش تکرار مجانبی برای مسائل حل پذیر و غیر حل پذیر

فرم کلی معادله دیفرانسیل مرتبه دوم به صورت زیر است

$$f''(x) = \lambda_0(x)f'(x) + s_0(x)f(x), \qquad (۲-۱)$$

که در آن و در تمام این پایانامه $f'(x)$ و $f''(x)$ به ترتیب به معنی مشتق مرتبه اول و دوم نسبت به متغیر داخل پرانتز است. در روش تکرار مجانبی باید $s_0(x)$ و $\lambda_0(x)$ دارای مشتقات تا مرتبه دلخواه باشند. اگر یکبار از معادله (۲-۱) نسبت به متغیر x مشتق بگیریم، داریم:

$$f'''(x) = \lambda_0'(x)f'(x) + \lambda_0(x)f''(x) + s_0'(x)f(x) + s_0(x)f'(x), \qquad (۲-۲)$$

که با جاگذاری $f''(x)$ از معادله (۲-۱) خواهیم داشت

$$f'''(x) = \lambda_1(x)f'(x) + s_1(x)f(x), \qquad (۲-۳)$$

که در آن

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + s_0(x) + \lambda_0^2(x), \qquad (۲-۴-\text{الف})$$

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x). \qquad (۲-۴-\text{ب})$$

با مشتق گیری مجدد از معادله (۲-۳) و جای گذاری $f''(x)$ از معادله (۲-۱) در آن خواهیم داشت:

$$f^{(4)}(x) = \lambda_2(x)f'(x) + s_2(x)f(x), \qquad (۲-۵)$$

که در آن

$$\lambda_2(x) = \lambda_1'(x) + s_1(x) + \lambda_0(x)\lambda_1(x), \qquad (۲-۶-\text{الف})$$

$$s_2(x) = s_1'(x) + s_0(x)\lambda_1(x). \qquad (۲-۶-\text{ب})$$

با ادامه دادن این فرایند برای مشتق های $(k+1)$ام و $(k+2)$ام خواهیم داشت:

$$f^{(k+1)}(x) = \lambda_{k-1}(x)f'(x) + s_{k-1}(x)f(x), \qquad (۲-۷)$$

$$f^{(k+2)}(x) = \lambda_k(x)f'(x) + s_k(x)f(x), \qquad (۲-۸)$$

که

$$\lambda_k(x) = \lambda'_{k-1}(x) + s_{k-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{k-1}(x), \qquad (۲-۹-الف)$$

$$s_k(x) = s'_{k-1}(x) + s_0(x)\lambda_{k-1}(x). \qquad (۲-۹-ب)$$

همچنین با تقسیم رابطه (۲-۸) به (۲-۷) عبارت زیر بدست می‌آید.

$$\frac{f^{(k+2)}(x)}{f^{(k+1)}(x)} = \frac{\lambda_k(x)f'(x) + s_k(x)f(x)}{\lambda_{k-1}(x)f'(x) + s_{k-1}(x)f(x)} \;, \qquad (۲-۱۰)$$

که با دقت در آن ملاحظه می‌شود که سمت چپ عبارت بالا برابر مشتق لگاریتم طبیعی $f^{(k+1)}(x)$ است لذا می‌توان به فرم ساده تر زیر نوشت:

$$\frac{d}{dx}\ln\left(f^{(k+1)}\right) = \frac{\lambda_k(x)\left(f'(x) + \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)}f(x)\right)}{\lambda_{k-1}(x)\left(f'(x) + \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)}f(x)\right)} \;. \qquad (۲-۱۱)$$

حال اگر در عبارت بالا به ازای k معینی $\frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)}$ شود عبارت سمت راست به $\frac{\lambda_k(x)}{\lambda_{k-1}(x)}$ساده می‌شود و این شرط همان وجه مجانبی بودن روش تکرار مجانبی است که می‌توان آن را به شکل زیر نوشت:

$$\delta_k \equiv s_k(x)\lambda_{k-1}(x) - s_{k-1}(x)\lambda_k(x) = 0. \qquad (۲-۱۲)$$

بنابراین در صورت بر قرار شدن شرط (۲-۱۲) و با توجه به رابطه (۲-۹)، رابطه (۲-۱۱) به شکل زیر ساده می‌شود:

$$\frac{d}{dx}\ln\left(f^{(k+1)}\right) = \frac{{\lambda_{k-1}}'(x)}{\lambda_{k-1}(x)} + \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} + \lambda_0(x) \;, \qquad (۲-۱۳)$$

که با تعریف

$$\alpha(x) \equiv \frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} \;, \qquad (۲-۱۴)$$

و انتگرال گیری از طرفین رابطه (۲-۱۳) خواهیم داشت

$$f^{(k+1)}(x) = C_1\lambda_{k-1}(x)\exp\left(\int^x(\alpha(t) + \lambda_0(t))dt\right), \qquad (۲-۱۵)$$

که در آن C_1 ثابت انتگرال گیری است. با جای گذاری رابطه (۲-۱۵) در (۲-۷) خواهیم داشت

$$C_1\lambda_{k-1}(x)\exp\left(\int^x(\alpha(t) + \lambda_0(t))dt\right) = \lambda_{k-1}(x)f'(x) + s_{k-1}(x)f(x), \qquad (۲-۱۶)$$

که نتیجه می‌دهد:

$$f'(x)+\alpha(x)f(x)=p(x)\ ,\qquad p(x)=\exp\left(\int^{x}(\alpha(t)+\lambda_0(t))dt\right),\qquad (۱۷-۲)$$

حال اگر دو طرف رابطه بالا را در $e^{\int^{x}\alpha(m)dm}$ ضرب کنیم خواهیم داشت

$$e^{\int^{x}\alpha(m)dm}f'(x)+\alpha(x)e^{\int^{x}\alpha(m)dm}f(x)=p(x)\ e^{\int^{x}\alpha(m)dm},\qquad (۱۸-۲)$$

رابطه بالا را می‌توان به فرم ساده‌تر زیر نوشت

$$\frac{d}{dx}\left(e^{\int^{x}\alpha(m)dm}f(x)\right)=p(x)\ e^{\int^{x}\alpha(m)dm},\qquad (۱۹-۲)$$

و در نتیجه با انتگرال گیری و جاگذاری $p(x)$ از معادله (۲-۱۷) داریم

$$f(x)=\exp\left(-\int^{x}\alpha(m)dm\right)\left[C_2+C_1\int^{x}\exp\left(\int^{m}(2\alpha(m)+\lambda_0(m))dm\right)dt\right],\qquad (۲۰-۲)$$

بنابراین مشاهده می‌شود که با برقراری شرط (۲-۱۲) می‌توان جواب (۲-۲۰) را برای معادله دیفرانسیل (۲-۱) بدست آورد. یعنی جواب معادله دیفرانسیل مورد نظر اولیه بدست آمده است. از سوی دیگر ویژه مقدار مسئله(به طور مثال ویژه مقدار E) یا در $s_0(x)$ و یا در $\lambda_0(x)$ است، بنابراین با توجه به روابط (۲-۹) $s_k(x)$ و $\lambda_k(x)$ نیز تابعی از آن ویژه مقادیر خواهد بود. پس معادله (۲-۱۲) نیز تابعی از ویژه مقدار خواهد بود و در نتیجه می توانیم به ازای هر k دلخواه ریشه‌های معادله (۲-۱۲) را برحسب ویژه مقدار بدست آوریم. در واقع برای مسائل حل پذیر به ازای هر k می‌توانیم با استفاده از ریشه‌های (۲-۱۲) یک ویژه مقدار و همچنین با استفاده از رابطه (۲-۲۰) یک ویژه تابع جدید بدست آوریم. به بیان دیگر با آغاز از $n=0$ و قرار دادن $s_{-1}=0$ و $\lambda_{-1}=1$ [۴۳] و با استفاده از ریشه‌های رابطه (۲-۱۲) ویژه مقدار و با استفاده از رابطه (۲-۲۰) ویژه تابع مربوط به آن را با جای گذاری ویژه مقادیر بدست آمده محاسبه کنیم. سپس با استفاده از روابط (۲-۹)، $s_1(x)$ و $\lambda_1(x)$ را محاسبه نموده و برای آنها نیز ویژه مقدار و ویژه تابع را بدست می‌آوریم. با ادامه دادن این فرایند تا هر k دلخواهی می‌توان ویژه مقادیر و ویژه توابع را بدست آورد. البته در بیشتر مسائل می‌توان با مقایسه جواب چند تکرار اول روابط کلی برای ویژه مقادیر و ویژه توابع ارائه کرد.

در مورد مسائل غیر حل پذیر ریشه‌های ویژه مقدار در رابطه (۲-۱۲) تابعی از x خواهد بود و در نتیجه نمی‌توان جوابی تحلیلی برای ویژه مقادیر بدست آورد. در این دسته از مسائل برای بدست آوردن ویژه مقادیر به صورت عددی به این شکل عمل می کنیم که ریشه‌های ویژه مقدار در رابطه (۲-۱۲) را در هر تکرار به ازای $x=x_0$ معینی، و با مقدار دهی به کمیت‌های مسئله، بدست می‌آوریم. مشاهده خواهد شد که ریشه‌های این فرایند با افزایش k به سمت اعداد خاصی همگرا می‌شوند، این اعداد همان ویژه مقادیر مسئله می‌باشند. این فرایند برای رسیدن به ویژه مقادیر گاهی بسیار طولانی است به این معنی که به ازای kهای بزرگ همگرایی مورد نظر رخ می‌دهد که لازم است با کمک رایانه محاسبات انجام شود. نکته‌ای که اینجا دارای اهمیت است بهبود سرعت همگرایی است. به این معنی که به ازای kهای کوچکتری بتوان به جواب رسید از اینرو انتخاب نقطه x_0 مناسب در بهبود سرعت همگرایی بسیار مهم است. ضمن اینکه هنوز روش جامعی برای یافتن نقطه مناسب x_0 وجود ندارد، اما در مورد مسائل غیر نسبیتی (معادله شرودینگر) یک انتخاب مناسب برای x_0 می‌تواند جایی باشد که تابع موج در آنجا بیشینه می‌شود که معادل با کمینه پتانسیل است. انتخاب‌های دیگر می‌تواند از $s_0(x)=0$ و یا $\lambda_0(x)=0$ بدست آیند. روش دیگری که می‌توان با آن سرعت همگرایی را بهبود داد وارد کردن فاکتوری مانند β در مسئله است که با تغییر آن بتوان به حالت بهینه برای رسیدن به جواب دست یافت که در مرجع [۴۳] این روش معرفی و بررسی شده است.

۲-۱-۳ روش تکرار مجانبی برای دو معادله کوپل شده مرتبه اول

روش تکرار مجانبی که در بخش قبل مطرح شد برای معادله دیفرانسیل مرتبه دوم خطی همگن بوده است در حالی که می‌توان دید که دو معادله دیفرانسیل مرتبه اول کوپل شده به صورت زیر، که قابلیت تبدیل شدن به معادله دیفرانسیل مرتبه دوم خطی همگن را دارد، را نیز می‌توان با روش تکرار مجانبی بررســـی کرد که در این بخش به آن می‌پردازیم. به بیان دیگر برای حل دو معادله کوپل شده به شکل زیر:

$$\begin{cases} f'(x) = \lambda_0(x)f(x) + s_0(x)g(x), & (۲-۲۱-\text{الف}) \\ g'(x) = \omega_0(x)f(x) + p_0(x)g(x), & (۲-۲۱-\text{ب}) \end{cases}$$

می‌توانیم $f(x)$ را از معادله (۲-۲۱-الف) بدست آورده و در (۲-۲۱-ب) قرار دهیم تا به معادله دیفرانسیل مرتبه دوم مشـــابه (۲-۱) دســت یابیم و روش تکرار مجانبی را بر روی آن اعمال کنیم. ولی در اینجا به دنبال یافتن راهی هســتیم که بتوان بدون ترکیب دو معادله آن را حل کرد. اگر از معادلات (۲-۲۱) نسبت به x مشتق بگیریم و در آن $f'(x)$ و $g'(x)$ را از رابطه (۲-۲۱) جای گذاری کنیم خواهیم داشت:

$$\begin{cases} f''(x) = \lambda_1(x)f(x) + s_1(x)g(x), & (۲-۲۲-\text{الف}) \\ g''(x) = \omega_1(x)f(x) + p_1(x)g(x), & (۲-۲۲-\text{ب}) \end{cases}$$

که در آن

$$\lambda_1(x) = \lambda_0'(x) + \lambda_0(x)\lambda_0(x) + s_0(x)\omega_0(x), \quad (۲-۲۳-\text{الف})$$

$$s_1(x) = s_0'(x) + s_0(x)\lambda_0(x) + p_0(x)s_0(x), \quad (۲-۲۳-\text{ب})$$

$$\omega_1(x) = \omega_0'(x) + \lambda_0(x)\omega_0(x) + p_0(x)\omega_0(x), \quad (۲-۲۳-\text{پ})$$

$$p_1(x) = p_0'(x) + s_0(x)\omega_0(x) + {p_0}^2(x). \quad (۲-۲۳-\text{ت})$$

به شکل مشابه‌ای، مشتق kام را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\begin{cases} f^{(k)}(x) = \lambda_{k-1}(x)f(x) + s_{k-1}(x)g(x), & (۲-۲۴-\text{الف}) \\ g^{(k)}(x) = \omega_{k-1}(x)f(x) + p_{k-1}(x)g(x), & (۲-۲۴-\text{ب}) \end{cases}$$

که در آن

$$\lambda_k(x) = \lambda_{k-1}'(x) + \lambda_0(x)\lambda_{k-1}(x) + s_{k-1}(x)\omega_0(x), \quad (۲-۲۵-\text{الف})$$

$$s_k(x) = s_{k-1}'(x) + s_0(x)\lambda_{k-1}(x) + p_0(x)s_{k-1}(x), \quad (۲-۲۵-\text{ب})$$

$$\omega_k(x) = \omega_{k-1}'(x) + \lambda_0(x)\omega_{k-1}(x) + p_{k-1}(x)\omega_0(x), \quad (۲-۲۵-\text{پ})$$

$$p_k(x) = p_{k-1}'(x) + s_0(x)\omega_{k-1}(x) + p_{k-1}(x)p_0(x). \quad (۲-۲۵-\text{ت})$$

از نسبت مشتق $(k+2)$ام به $(k+1)$ام عبارت $f(x)$ داریم: