

ح) اطلاعات مربوط به عنوان پایان نامه :

عنوان فارسی پایان نامه :

روش های تفاضل متناهی گام متغیر برای حل مسائل اشتورم لیوویل

عنوان لاتین پایان نامه:

Variable-step finite difference schemes for the solution of Sturm-Liouville problems

واژگان کلیدی فارسی:

اشتورم لیوویل، حل عددی، تفاضل متناهی، گام متغیر

واژگان کلیدی لاتین:

Sturm Liouville, finite difference, numerical solution, variable step

در اوایل سده هیجدهم مطالعه بر روی حرکات ارتعاشی منجر به پیدایش مسائل مقدار ویژه گردید. در مقاله براک تیلور^۱ در مورد سیم مرتعش (۱۷۱۳م) و همچنین در مقاله جان برنولی^۲ در مورد رشته آویزان، اولین مقدار ویژه محاسبه شده است. آلبرت و اوایلر در سال ۱۹۴۷ با بررسی مسئلهی سیم مرتعش به یک معادله دیفرانسیل جزئی دست یافتند و مقادیر ویژه را از طریق روش جداسازی متغیرها یافتند. بعد از چندسال دو ریاضی دان فرانسوی به نامهای اشتورم و لیوویل موضوع جدیدی را در آنالیز ریاضی که بعدها تحت عنوان نظریه اشتورم لیوویل معرفی شد در یک سری از مقالات بین سالهای ۱۸۳۶ و ۱۸۳۷ مطرح کردند. این نظریه در مورد معادلات دیفرانسیل خطی مرتبه دوم عمومی زیر بحث می‌گردد:

$$\begin{aligned} (k(x)V'(x))' + (rg(x) - l(x))V(x) &= 0 \\ \begin{cases} k(x)V'(x) - hV(x) = 0 \\ k(x)V'(x) + HV(x) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

که در آن l, g, k توابعی معلوم‌اند و h, H ثابت‌های مثبت‌اند و r یک پارامتر است. این مسئله مقدار مرزی جواب‌های غیربدیهی را به‌ازای مقادیر معینی از r می‌پذیرد مقادیری از r که به‌ازای آن‌ها جواب‌های غیربدیهی برای مسئله به‌دست می‌آید را مقادیر ویژه مسئله^۳ و جواب‌های غیربدیهی متناظر را توابع ویژه^۴ می‌نامند. مقادیر ویژه r ریشه‌های معادله متعالی $\pi(r) = 0$ می‌باشند. این معادله از طریق قراردادن جواب عمومی معادله دیفرانسیل

$$k(x)V'(x) - hV(x) = 0$$

در شرایط مرزی

$$k(x)V'(x) + HV(x) = 0$$

با فرض داشتن جواب‌های غیربدیهی برای معادله اصلی به‌دست می‌آید. مباحثی که اشتورم و لیوویل بر روی این‌گونه مسائل انجام دادند در سه زیرگروه

- خصوصیات مقادیر ویژه
- رفتار کیفی توابع ویژه
- بسط توابع دلخواه به‌صورت یک‌سری نامتناهی از توابع ویژه

مسئله اول و دوم یک مسئله اشتورم لیوویل وابسته به تنها پارامتر r می‌باشد. در برخی موارد حل مسئله مرکب برای معادلات سهموی و هذلولوی از طریق روش جداسازی متغیرها یا روش‌های دیگر منجر به پیدایش مسئله اشتورم لیوویل وابسته به دو پارامتر می‌گردد. این موارد اکثراً در فیزیک و مهندسی به‌ویژه در مکانیک سیالات، جامدات و در مکانیک کوانتوم برای تعیین سطوح انرژی رخ می‌دهد.

تئوری اشتورم لیوویل زیربنایی برای توسعه روش‌های طیفی و نظریه عملگرهای خودالحاق می‌باشد [1]. کاربردهای بسیار مسائل اشتورم لیوویل به‌عنوان مسائل مقدار مرزی مورد مطالعه قرار گرفته است [2]. بسیاری از پدیده‌های فیزیکی هم در

^۱ Brook Taylor

^۲ Johann Bernouli

^۳ eigenvalue

^۴ eigenfunction

مکانیک کلاسیک و هم در مکانیک کوانتوم از نظر ریاضیاتی با مدل‌بندی در قالب مسائل اشتورم لیوویل قابل توصیف هستند. به همین دلیل در سال‌های اخیر علاقه به تحقیق در این زمینه را بیشتر کرده است [3]. اینگونه مسائل اغلب در مکانیک کوانتوم در تعیین سطوح انرژی ظاهر می‌شوند.

روش‌های عددی بسیاری برای تقریب زدن مقادیر ویژه در مسئله اشتورم لیوویل وجود دارد. می‌توان تکنیک‌های تعبیه‌سازی معکوس^۱ را به‌کاربرد [4,5] راه دیگر تبدیل مسئله مقدار ویژه به دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه اول و استفاده از روش‌های رونگه کوتا^۲ و هم‌محلی^۳ می‌باشد [6] می‌توان تکنیک‌های عددی متداول برای حل معادلات دیفرانسیل عادی مرتبه دوم مثل نومرو^۴، رونگه-کوتا-نیستروم^۵ و یا روش‌های وگلار^۶ ترکیب شده با تکنیک‌های پرتابی^۷ را استفاده کرد. [11,12,18,22]. روش‌های خوب دیگر که می‌توان به‌کار برد روش‌هایی هستند که از مشخصه‌های تغییراتی شامل ریلی-ریتس استفاده می‌کنند. وقتی که تنها چند مقدار اول از مقادیر ویژه مطلوب باشند این روش رضایت بخش هستند اما زمانی که بخواهیم تعداد زیادی از مقادیر ویژه را به‌دست آوریم کاربرد این روش‌ها مورد تردید واقع می‌شود زیرا دقت محاسبات به یک مسئله چالش برانگیز تبدیل می‌شود. یک مثال معروف این دسته معادله شعاعی شرودینگر است. به‌موجب رفع کاستی‌های این روش‌ها روش‌های جدیدی بر مبنای اختلاف ضرایب مانند روش **LP** یا **CP** [16,17,20] یا روش تاو-گوس-لژاندر (**LGT**) ایجاد شدند [2,13,23,19].

بنابراین روش‌های عددی و هم‌چنین بسته‌های نرم‌افزاری بسیاری برای حل این نوع مسائل با توجه به خواص و ویژگی‌های آن‌ها موجود است که از جمله آن‌ها روش **SLEIGN** که در سال ۱۹۷۸ توسط بیلی^۸، گوردن^۹، شامپاین^{۱۰} [16] اولین روشی بود که برای حل مسائل اشتورم لیوویل مرتبه دوم تکین و مسائل اشتورم لیوویل با شرایط خودالحاق و جداپذیر به‌کاربرده شد. هم‌چنین بسته‌های نرم‌افزاری **SLEDGE** از فولتون^{۱۱} و پروس^{۱۲} [4] روش **SLEIGN 2** توسط بیلی و اوریت^{۱۳} و زتل^{۱۴} [17] برای حل هر نوع مسائل اشتورم لیوویل مرتبه دوم با شرایط مرزی خودالحاق، جداپذیر به‌کار می‌رود.

Invariant embedding techniques ^۱

Runge Kutta ^۲

collocation ^۳

Numerov ^۴

Runge-Kutta-Nystrom ^۵

De Vogelaere ^۶

Shooting method ^۷

Bailly ^۸

Gordon ^۹

Shampine ^{۱۰}

Fulton ^{۱۱}

Pruess ^{۱۲}

Everitt ^{۱۳}

Zettl ^{۱۴}

بالاخره روش **SLEUTH** که توسط گرینبرگ^۱ و مارلتا^۲ [19] برای حل مسائل اشتورم لیوویل مرتبه چهارم با شرایط مرزی جداپذیر موجود می‌باشد.

حال ما براساس ایده‌ای در [7,8] یک دیدگاه توانمند برای حل مسائل اشتورم لیوویل منفرد و منظم طبقه‌بندی کننده نقاط پایانی بازه تحت عنوان نقاط حدی **LP**، نقاط منظم و منفرد، دایره‌های حدی **LC**، نوسانی **LCO** و غیرنوسانی **LCNO** ارائه می‌کنیم. با استفاده از روش‌های مزبور مشتقات مسائل اشتورم لیوویل را به‌طورمجزا تقریب می‌زنیم سپس معادله دیفرانسیل مرتبه دوم به یک معادله مرتبه اول هم ارز تبدیل نمی‌شود. یکی دیگر از اهداف ما در این پایان نامه این است که آیا در این روش نسبت به روش‌های قبلی هزینه محاسباتی کمتری مواجه خواهیم شد؟ هم‌چنین قصد داریم نشان دهیم که آیا روش ارائه شده با گام ثابت برای حل یک مسئله اشتورم لیوویل منفرد که از محاسبات عددی مقادیر و توابع ویژه‌ی تبدیل هنکل متناهی موثر و مفید خواهند بود؟

سپس نتایج بدست‌آمده را مورد بررسی قرار خواهیم داد و به دنبال تست یک الگوریتم با مرتبه و گام متغیر خواهیم بود. هدف اصلی ما موردتوجه قراردادن موثرتر شدن و دقت بالاتر روش مذکور با لحاظ گام متغیر می‌باشد.

^۱ Greenberg

^۲ Marletta

کدهای بسیاری برای حل مسائل منظم و منفرد اشتورم لیوویل ارائه شده است. در ابتدا بسته‌ی نرم افزاری فرتن به نام **SLEIGN** که به طور خودکار مقادیر ویژه و توابع ویژه‌ی برخی از رده‌های خاص مسئله‌ی **SLP** را با استفاده از تبدیل پروفر و خواص نوسانی تابع ویژه‌ها بدست می‌آورد ارائه شد [14,15,17,22]. در این الگوریتم می‌بایست معادله دیفرانسیل مرتبه دوم خطی به یک معادله مرتبه اول غیرخطی تبدیل شود. اگرچه کد آن قابل اطمینان است بعضی اوقات کند کار می‌کند و برای برخی مسائل با شکست مواجه می‌شود.

به همین دلیل یک نسخه‌ی جدید از این کد به نام **SLEIGN 2** [16] برای حل هر شرایط مرزی جفت‌شده یا مجزا یا خودالحاق و تا حدودی همه‌ی رده‌ی نقاط پایانی بازه‌ها کاراست. براساس تقریب ضرایب معرفی شده توسط پروس [25] دو کد فرتن دیگر ارائه شد. هردو بسته تخمین‌هایی را برای مقادیر و توابع ویژه‌ی مسائل منفرد و منظم برای طبقه‌بندی نقاط پایانی و طیف مقادیر ویژه تولید می‌کنند. به ویژه کد **SLEIGN** در [26] خطای سراسری را کنترل می‌کند درحالی‌که **SL02F** در [27] از تبدیل پروفر استفاده می‌کند. اخیراً یک کد متلب به نام **MATSLISE** در [21] با به کارگیری روش‌های اختلال ثابت برای حل مسائل اشتورم لیوویل منظم، معادلات شرودینگر یک بعدی، معادلات شرودینگر شعاعی با پتانسیل کلمب (دارای خطا) ارائه شده است. در واقع چهار کد اول طیف وسیع‌تری از مسائل کاربردی را نسبت به مورد آخر دربرمی‌گیرند. اگرچه مورد آخر در رده‌ی معادلات مذکور موثرتر است.

همه‌ی این کدها از تکنیک‌های استاندارد **ODE** برای حل مسئله‌ی گسسته مربوط به **SLPs** استفاده می‌کنند. در طی این سال‌ها یک رده از روش‌های ماتریسی هم‌چنین توسعه یافت که مسئله‌ی پیوسته را به یک مسئله مقدار ویژه‌ی ماتریسی تبدیل می‌کرد از جمله این روش‌ها عبارتند از: روش تفاضلات متناهی، روش المان متناهی (اجزا محدود) برای **SLPs**.

به منظور توسعه‌ی عددی تقریب عددی مقادیر ویژه، اصلاحات مجانبی رو برخی روش‌ها صورت گرفت [13,24].

در ادامه‌ی این دیدگاه در [1,2,3] خانواده‌ای از روش‌های مقدار مرزی **BVMs** برای تقریب زدن هم‌زمان مقادیر و توابع ویژه **SLPs** ارائه شدند [18]. براساس این ایده در [7,8] ما یک دیدگاه متفاوت برای حل مسائل اشتورم لیوویل منفرد و منظم که در نقطه پایانی بازه منفرد یا منظم، نقاط حدی **LP** یا دواير حدی **LC** و دواير حدی نوسانی و غیرنوسانی ارائه کرده‌ایم. روش‌های مذکور مشتقات مسئله‌ی اشتورم لیوویل را به طور مجزا تقریب می‌زنند. بنابراین معادله دیفرانسیل مرتبه دوم به یک سیستم مرتبه اول هم‌ارز تبدیل نمی‌شود. این باعث کاهش هزینه محاسباتی و رویکرد انتخاب سائز گام آسان‌تر می‌شود. بیش‌تر روش‌های استفاده‌شده تفاضلات متناهی مرکزی مرتبه بالا هستند درحالی‌که فرمول‌های اضافی دیگری که ارائه شده‌اند به رده‌بندی مسائل اشتورم لیوویل روی نقاط پایانی بازه‌ها وابسته‌اند.

است که آیا در این روش نسبت به روش های قبلی هزینه محاسباتی کمتری مواجه خواهیم شد؟ هم چنین قصد داریم نشان دهیم که آیا روش ارائه شده با گام ثابت برای حل یک مسئله اشتورم لیویل منفرد که از محاسبات عددی مقادیر و توابع ویژه‌ی تبدیل هنکل متناهی موثر و مفید خواهند بود؟

سپس نتایج بدست آمده را مورد بررسی قرار خواهیم داد و به دنبال تست یک الگوریتم با مرتبه و گام متغیر خواهیم بود. هدف اصلی ما مورد توجه قراردادن موثرتر شدن و دقت بالاتر روش مذکور با لحاظ گام متغیر می باشد.

۶) هدف ها:

است که آیا در این روش نسبت به روش های قبلی هزینه محاسباتی کمتری مواجه خواهیم شد؟ هم چنین قصد داریم نشان دهیم که آیا روش ارائه شده با گام ثابت برای حل یک مسئله اشتورم لیویل منفرد که از محاسبات عددی مقادیر و توابع ویژه‌ی تبدیل هنکل متناهی موثر و مفید خواهند بود؟

سپس نتایج بدست آمده را مورد بررسی قرار خواهیم داد و به دنبال تست یک الگوریتم با مرتبه و گام متغیر خواهیم بود. هدف اصلی ما مورد توجه قراردادن موثرتر شدن و دقت بالاتر روش مذکور با لحاظ گام متغیر می باشد.

۷) کاربردهای متصور از تحقیق:

یکی از مباحث مهم که در معادلات دیفرانسیل مورد توجه قرار می‌گیرد معادله دیفرانسیل مرتبه دوم می‌باشد. زیرا اکثر معادلاتی که در علوم مختلف استنتاج می‌شوند معادله مرتبه دوم هستند یکی از این معادلات معادله اشتورم لیوویل است. این معادله در فیزیک کاربرد زیادی دارد و بسیاری از معادلاتی که در فیزیک به دست می‌آیند به معادله اشتورم لیوویل مربوط می‌شوند که از آن جمله می‌توان به معادله ارتعاش نخ اشاره کرد. مطالعه پدیده‌های فیزیکی دیگر مثل ارتعاش سیم‌ها، فعل و انفعالات ذرات اتمی یا نواسانات آزاد زمین به مسائل اشتورم لیوویل ختم می‌شود. بنابراین با وجود این کاربردهای بسیار اینگونه مسائل یافتن الگوریتمی کارا تر برای حل عددی، گام مهمی در تمام این معادلات و پدیده‌های علمی (اعم از فیزیک و شیمی) برداشته خواهد شد/

۸) مراجع استفاده کننده از نتیجه پایان نامه :

۹) روش انجام تحقیق:

۹-۱) روش و ابزار گرد آوری اطلاعات :

شبیه‌سازی‌های پایان نامه عموماً با نرم افزار فرترن و متلب صورت گرفته است.

۹-۲) روش تجزیه و تحلیل داده ها

۹-۳) قلمرو تحقیق (زمانی ، مکانی ، موضوعی) :

۱۰) جامعه آماری و روش نمونه گیری

- [1] W.O. Amrein, A.M. Hinz, D.B. Pearson, Sturm–Liouville Theory: Past and Present, Birkhäuser, Basel, 2005
- [2] A. Zettl, Sturm–Liouville Theory, vol. 121, American Mathematical Society, 2010.4 (2009), 113–127.
- [3] L. Aceto, P. Ghelardoni and C. Magherini, Boundary value methods as an extension of Numerov’s method for Sturm-Liouville eigenvalue estimates, Appl. Numer. Math. 59 (7) (2009), 1644–1656.
- [4] P. Amodio, C. Budd, O. Koch, G. Settanni and E.B. Weinmüller, Computations for a Model of Flow in Concrete, ASC Report 26/2012, Institute for Analysis and Scientific Computing, Vienna University of Technology, Wien.
- [5] P. Amodio and G. Settanni, Variable step/order generalized upwind methods for the numerical solution of second order singular perturbation problems, J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math. 4 (2009), 65–76.
- [6] P. Amodio and G. Settanni, A deferred correction approach to the solution of singularly perturbed BVPs by high order upwind methods: implementation details, in: Numerical analysis and applied mathematics - ICNAAM 2009. T.E. Simos, G. Psihoyios and Ch. Tsitouras (eds.), AIP Conf. Proc. 1168, issue 1 (2009), 711–714.
- [7] P. Amodio and G. Settanni, High order finite difference schemes for the numerical solution of eigenvalue problems for IVPs in ODEs, in: Numerical analysis and applied mathematics - ICNAAM 2010. T.E. Simos, G. Psihoyios and Ch. Tsitouras (eds.), AIP Conf. Proc. 1281, issue 1 (2010), 202–204.
- [8] P. Amodio and G. Settanni, A matrix method for the solution of Sturm-Liouville problems, JNAIAM J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math. 6 (2011), 1–13.
- [9] P. Amodio, T. Levitina, G. Settanni and E.B. Weinmüller, On the Calculation of the Finite Hankel Transform Eigenfunctions, J. Appl. Math. Comput. 43 (2013), pp. 151–173, doi: 10.1007/s12190-013-0657-1.
- [10] P. Amodio, T. Levitina, G. Settanni, E.B. Weinmüller, Numerical simulation of the whispering gallery modes in prolate spheroids, accepted to a Computer Physics Communications.
- [11] P. Amodio and I. Sgura, High-order finite difference schemes for the solution of second-order BVPs, J. Comput. Appl. Math. 176 (2005), 59–76.
- [12] P. Amodio and I. Sgura, High order generalized upwind schemes and numerical solution of singular perturbation problems, BIT 47 (2007), 241–257.
- [13] A.L. Andrew and J.W. Paine, Correction of Numerov’s eigenvalue estimates, Numer. Math. 47 (1985), 289–300.
- [14] P.B. Bailey, SLEIGN: an eigenfunction–eigenvalue code for Sturm–Liouville problems, SAND77-2044, Sandia Laboratories, Albuquerque (1978).
- [15] P.B. Bailey, B.S. Garbow, H.G. Kaper and A. Zettl, Eigenvalue and eigenfunction computations for Sturm-Liouville Problems, ACM Trans. Math. Software 17 (1991), 491–499.
- [16] P.B. Bailey, W.N. Everitt and A. Zettl, Algorithm 810: the SLEIGN2 Sturm-Liouville Code, ACM Trans. Math. Software 27 (2001), 143–192.
- [17] P.B. Bailey, M.K. Gordon and L.F. Shampine, Automatic solution of the Sturm-Liouville problem, ACM Trans. Math. Software 4 (1978), 193–208.
- [18] L. Brugnano and D. Trigiante, Solving Differential Problems by Multistep Initial and Boundary Value Methods, Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam, 1998.
- [19] W.N. Everitt, A catalogue of Sturm-Liouville differential equations, in: Sturm-Liouville Theory. Past and Present, W.O. Amrein, A.M. Hinz and D.P. Pearson (eds.), Birkhäuser, 2005.
- [20] L.Gr. Ixaru, H. De Meyer and G. Vanden Berghe, SLCPM12 – A program for solving regular Sturm-Liouville problems, Comput. Phys. Comm. 118 (1999), 259–277.
- [21] V. Ledoux, M. Van Daele and G. Vanden Berghe, MATSLISE: a MATLAB package for the numerical solution of Sturm-Liouville and Schrödinger equations, ACM Trans. Math. Software 31 (2005), 532–554.

- [22] M. Marletta, Certification of algorithm 700: numerical tests of the SLEIGN software for Sturm-Liouville problems, *ACM Trans. Math. Software* 17 (4) (1991), 481–490.
- [23] M. Marletta and J.D. Pryce, LCNO Sturm-Liouville problems: computational difficulties and examples, *Numer. Math.* 69 (3) (1995), 303–320
- [24] J.W. Paine, F.R. De Hoog and R.S. Anderssen, On the correction of finite difference eigenvalue approxiamtions for Sturm-Liouville problems, *Computing* 26 (1981), 123–139.
- [25] S. Pruess, Estimating the eigenvalues of Sturm-Liouville problems by approximating the differential equation, *SIAM J. Numer. Anal.* 10 (1973), 55–68.
- [26] S. Pruess and C.T. Fulton, Mathematical software for Sturm-Liouville problems, *ACM Trans. Math. Software* 19 (1993), 360–376.
- [27] S. Pruess and M. Marletta, Atomic solution of Sturm-Liouville problems using the Pruess method, *J. Comput. Appl. Math.* 39 (1992), 57–78.
- [28] J.D. Pryce, A test package for Sturm-Liouville solvers, *ACM Trans. Math. Software* 25 (1) (1999), 21–57.
- [29] J.D. Pryce, Numerical solution of Sturm-Liouville problems. Monographs on Numerical Analysis. Oxford Science Publications. The Clarendon Press, Oxford University Press, New York, 1993.
- [30] L. Aceto, P. Ghelardoni and G. Gheri, An algebraic procedure for the spectral corrections using the miss-distance functions in regular and singular Sturm-Liouville problems, *SIAM J. Numer. Anal.* 44 (2006), 2227–2243.
- [31] L. Aceto, P. Ghelardoni and C. Magherini, BVMs for Sturm-Liouville eigenvalue estimates with general boundary conditions, *J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*

