

یک روش بدون شبکه محلی به صورت قوی برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان دوبعدی

فریبا تخت آبنوس، احمد شیرزادی*

دانشگاه خلیج فارس، دانشکده علوم پایه، گروه ریاضی، بوشهر

پذیرش ۹۶/۱۱/۲۸

دریافت ۹۶/۱۰/۱۳

چکیده

در این مقاله یک روش بدون شبکه محلی بر پایه صورت قوی مسئله، برای حل معادله دوبعدی وابسته به زمان شرودینگر داده شده است. ابتدا متغیر زمان با استفاده از یک روش تفاضلات متناهی مناسب گسسته‌سازی شده است. سپس، در معادلات بیضوی حاصل، متغیر مکانی با استفاده از روش توابع پایه‌ای شعاعی محلی که در آن عملگر معادله دیفرانسیل جزئی نیز در ماتریس‌های محلی اعمال شده، گسسته‌سازی شده است. در روش ارائه شده، برخلاف روش‌های هم‌محلی سراسری، با تقسیم دامنه هم‌محلی سراسری به تعداد زیادی زیر ناحیه‌های محلی، پایداری روش به شدت افزایش می‌یابد. به علاوه، به دلیل استفاده از صورت قوی و روش هم‌محلی، که نیاز به محاسبه انتگرال ندارد، و همچنین به دلیل این که در عملیات ماتریسی، ماتریس‌ها با بعد کوچک هستند، هزینه محاسبات کاهش می‌یابد. برای خطی‌سازی معادلات غیرخطی، روشی تکراری معرفی شده است. دو مثال خطی و دو مثال غیرخطی با جواب تحلیلی معلوم و یک مثال غیرخطی با جواب نامعین و شرایط مرزی متناوب به وسیله این روش آزموده شده‌اند و نتایج عددی نشان‌دهنده دقت بالا و کارایی روش است.

واژه‌های کلیدی: توابع پایه‌ای شعاعی، معادله شرودینگر، روش‌های بدون شبکه محلی، روش هم‌محلی متناهی، روش تفاضلات متناهی.

۱. مقدمه

مسئله وابسته به زمان شرودینگر با تابع پتانسیل دلخواه، یکی از اساسی‌ترین معادلات مکانیک کوانتوم است. معادلات شرودینگر نقش اساسی در مکانیک کوانتوم نسبیتی و غیرنسبیتی دارند. به عنوان مثال در ۱۹۹۰ تورس-وگا و فردریک [1] معادلات شرودینگر را برای نشان دادن فاز تازه‌ای از مکانیک کوانتوم مدل‌سازی کردند. بسیاری از مسائل علوم مهندسی از قبیل اپتیک، زلزله‌شناسی و فیزیک پلاسما منجر به تشکیل این معادله می‌شوند [2]. همچنین، بسیاری از مسائل در زمینه‌های فیزیک حالت جامد، ساختار و طیف مولکولی و اتمی، دینامیک مولکول‌ها و شیمی کوانتومی منجر به حل معادله غیرخطی شرودینگر زیر می‌شوند:

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \Delta \psi + D(\mathbf{x})\psi + C(\mathbf{x})|\psi|^2 \psi, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1)$$

با فرض این که شرط اولیه به صورت

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = f(\mathbf{x}), \quad (2)$$

و شرایط مرزی بدین صورت باشند:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = h(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\psi, t > 0, \quad (۳)$$

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial n} = q(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_n, t > 0, \quad (۴)$$

که $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ یک دامنه هم‌بند متناهی، i عدد موهومی، D و C توابع حقیقی مقدار معین و ψ تابع مجهول مختلط مقدار موج است. h ، f و q توابعی داده شده و $\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_n \cup \Gamma_\psi$ که Γ_n و Γ_ψ به ترتیب شرط مرزی نیومن و دیریکله هستند و n بردار برون سوی عمود بر Ω است. توجه شود که اگر $C(x) = 0$ آن‌گاه معادله (۱) به صورت خطی تبدیل می‌شود. معادله (۱)، شامل صورت کلی بسیاری از معادلات شرودینگر غیرخطی است که در بسیاری از علوم مهندسی ظاهر می‌شوند. به عنوان مثال اگر $D(x) = 0$ ، حالت کلی معادله غیرخطی مکعبی است که معادله تمرکز نامیده می‌شود. [3] و [4] در زمینه‌های مباحث نظری این معادله مراجع کاملی هستند. معادله شرودینگر غیرخطی مکعبی در بسیاری از مباحث فیزیکی نمایان می‌شود؛ برای مثال در علم اپتیک، این معادله انتشار بالای یک پرتوی لیزر در یک وسیله را وقتی که از توزیع وارون امواج رادیویی چشم‌پوشی شده باشد، کنترل می‌کند [5]. اگر $D(x) = \frac{\omega}{2}|x|^2$ و $C(x) = c$ که یک متغیر ثابت است، آن‌گاه معادله حاصل به معادله گراس پیتاوسکی معروف است. وجود جواب‌های پایدار برای این معادله در [6] بررسی شده است. از آن‌جا که یافتن جواب‌های تحلیلی برای این معادله مشکل است و تنها در حالت‌های ساده امکان‌پذیر است، روش‌های عددی برای حل این معادله اهمیت به سزایی دارد. پژوهش‌های زیادی تاکنون برای حل عددی معادله شرودینگر صورت گرفته است. [7] یک روش شبه‌طیفی مرتبه چهار لاگور-ارمیت برای حل معادله گراس-پیتاوسکی ارائه شده است. روش‌های متعددی بر پایه تفاضلات متناهی برای حل معادله (۱) در [8]-[10] به کار گرفته شده است. هم‌چنین روش بدون شبکه پتروف-گلرکین محلی برای حل معادله (۱) در [11] بیان شده است. روش‌های بدون شبکه مختلفی در [12]-[15] برای حل عددی معادله (۱) ارائه شده است. در [16] یک طرح ضمنی جهتی متناوب برای حل معادله دوبعدی شرودینگر غیرخطی مکعبی به کار رفته است.

روش‌های بدون شبکه به علت انعطاف‌پذیری بالا و دقت زیاد جواب‌های عددی حاصل، در سال‌های اخیر توجه بسیاری از ریاضی‌دانان و مهندسان را به خود جلب کرده است. از یک دیدگاه، روش‌های بدون شبکه برای حل عددی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی به روش‌های محلی و روش‌های سراسری تقسیم می‌شوند. از قدیمی‌ترین روش‌های بدون شبکه محلی می‌توان به روش بدون شبکه پتروف-گلرکین محلی و روش بدون شبکه معادله انتگرال محلی اشاره کرد که در این روش‌ها هم تقریب جواب و هم آزمودن به روش محلی صورت می‌گیرد [17]-[28]. در [29] یک روش بدون شبکه محلی بر پایه توابع پایه‌ای شعاعی و روش هم‌محلی مطرح شده است. روش هم‌محلی متناهی روشی بدون شبکه محلی است که اخیراً در [30] ارائه شده است. در این روش علاوه بر هم‌محلی جواب مجهول عملگر معادله دیفرانسیل جزئی نیز در زیر دامنه‌های محلی و در ماتریس‌های محلی اعمال می‌شود.

در این مقاله برپایه روش هم‌محلی متناهی، روشی بدون شبکه محلی برای حل عددی معادله (۱) ارائه شده است. توجه شود که با در نظر گرفتن $\Psi = u + iv$ و با تفکیک کردن معادله (۱) به قسمت‌های حقیقی و موهومی، این معادله به دستگاه معادلات دیفرانسیل (۵) تبدیل می‌شود:

$$-\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta v + Dv + C(u^2 + v^2)v, \quad (۵)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \Delta u + Du + C(u^2 + v^2)u,$$

با شرط آغازین و شرایط مرزی:

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, 0) &= \operatorname{Re}(f(\mathbf{x})); & \mathbf{x} \in \Omega; \\ v(\mathbf{x}, 0) &= \operatorname{Im}(f(\mathbf{x})); & \mathbf{x} \in \Omega; \\ u(\mathbf{x}, t) &= \operatorname{Re}(h(\mathbf{x}, t)); & \mathbf{x} \in \Gamma_{\psi}, t > 0; \\ v(\mathbf{x}, t) &= \operatorname{Im}(h(\mathbf{x}, t)); & \mathbf{x} \in \Gamma_{\psi}, t > 0; \\ \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial n} &= \operatorname{Re}(q(\mathbf{x}, t)); & \mathbf{x} \in \Gamma_n, t > 0; \\ \frac{\partial v(\mathbf{x}, t)}{\partial n} &= \operatorname{Im}(q(\mathbf{x}, t)); & \mathbf{x} \in \Gamma_n, t > 0; \end{aligned} \quad (6)$$

که u و v توابع حقیقی مقدار هستند. دستگاه معادلات (۵) چگالی ذره و پتانسیل سرعت را نشان می‌دهد و به معادلات هیدرودینامیک کوانتومی معروف است که رسماً با معادلات حرکت غیرچرخشی در یک سیال کلاسیک متشابه هستند.

۲. روش بدون شبکه محلی ارائه شده برای حل معادله شرودینگر

فرض کنیم $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega \subset R^N$ شامل مجموعه‌ای از نقاط گسسته شده در دامنه Ω و روی مرز $\Gamma = \Gamma_{\psi} \cup \Gamma_n$ باشد. در زیربخش بعدی یک تقریب تفاضلات متناهی برای حذف متغیر زمان ارائه می‌شود. آن‌گاه معادله بیضوی مانند به دست آمده، گسسته و با یک روش بدون شبکه محلی حل می‌شود.

۲-۱. گسسته‌سازی زمان

چنان‌که قبلاً اشاره شد، برای حل معادله (۱)، دستگاه (۵) را در نظر می‌گیریم. یک تقریب تفاضلات متناهی برای مشتق زمان، روش θ است که بدین صورت بیان می‌شود:

$$\begin{aligned} \theta u^{k+1} + (1-\theta)u^k &= \frac{u^{k+1} - u^k}{\Delta t}, \quad 0 \leq \theta \leq 1, \\ \theta v^{k+1} + (1-\theta)v^k &= \frac{v^{k+1} - v^k}{\Delta t}. \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن دستگاه در لحظه $k\Delta t$ و $(k+1)\Delta t$ و با به کار بردن روش θ داریم:

$$\begin{aligned} -\frac{u^{k+1}(\mathbf{x}) - u^k(\mathbf{x})}{\Delta t} &= \theta[\Delta v(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))v(\mathbf{x})]^{k+1} \\ &+ (1-\theta)[\Delta v(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))v(\mathbf{x})]^k, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{v^{k+1}(\mathbf{x}) - v^k(\mathbf{x})}{\Delta t} &= \theta[\Delta u(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))u(\mathbf{x})]^{k+1} \\ &+ (1-\theta)[\Delta u(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))u(\mathbf{x})]^k, \end{aligned}$$

که در آن

$$u^k(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}, k\Delta t)$$

$$v^k(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x}, k\Delta t).$$

با قرار دادن $\theta = \frac{1}{2}$ داریم:

$$-u^{k+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} [\Delta v(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))v(\mathbf{x})]^{k+1} \quad (7)$$

$$= -u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} [\Delta v(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))v(\mathbf{x})]^k,$$

$$v^{k+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} [\Delta u(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))u(\mathbf{x})]^{k+1} \quad (8)$$

$$= v^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} [\Delta u(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) + C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))u(\mathbf{x})]^k.$$

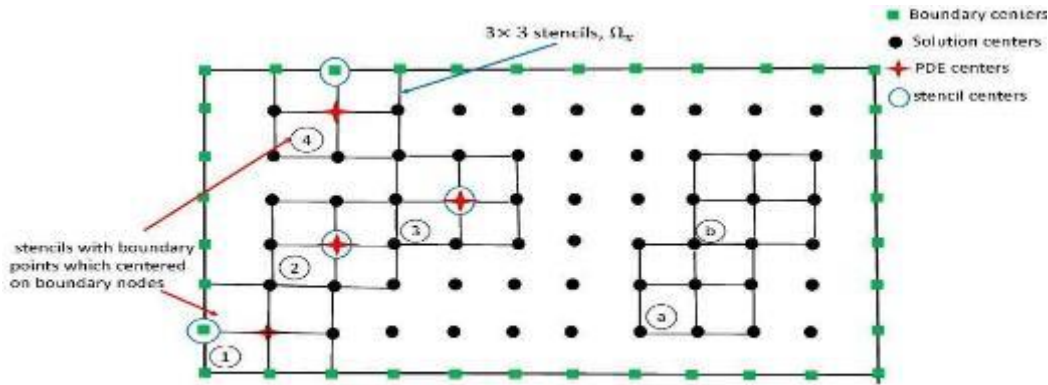
برای فائق آمدن بر قسمت‌های غیرخطی $(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^{k+1}v^{k+1}(\mathbf{x})$ و $(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^{k+1}u^{k+1}(\mathbf{x})$ روشی تکراری به کار می‌بریم؛ بدین صورت که در هر گام زمانی، در تکرار اول به جای عبارت $(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^{k+1,0}$ ، مقدار $(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^k$ را قرار می‌دهیم. بنابراین، با اعمال روش تکراری روی معادلات غیرخطی (۷) و (۸)، به دستگاه معادلات خطی زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} & u^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \Delta v^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x})v^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^{k+1,m}v^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ & = u^k(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \Delta v^k(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x})v^k(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^k v^k(\mathbf{x}), \\ & v^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \Delta u^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x})u^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ & - \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^{k+1,m}u^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ & = v^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \Delta u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x})u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x})(u^2(\mathbf{x}) + v^2(\mathbf{x}))^k u^k(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (9)$$

که در آن m نشان‌دهنده m -امین تکرار است.

۲-۲. گسسته‌سازی متغیر مکان

یک مجموعه به تعداد $N = N_1 + N_2$ نقطه مجزا را در نظر می‌گیریم که تعداد N_1 از آن در داخل Ω و N_2 نقطه باقی‌مانده از آن روی مرز باشند. اطراف هر $l = 1, \dots, N_1, \mathbf{x}_l \in \Omega$ ، یک استنسیل به مرکز \mathbf{x}_l که شامل n نقطه از همسایگی نقاط آن است، در نظر می‌گیریم. \mathbf{x}_l نقطه مرکزی نامیده می‌شود. در معادله (۹) متغیرهای میدانی u و v باید در مرحله‌های زمانی k -ام و $k+1$ -ام گسسته‌سازی شوند. در مرحله $k+1$ -ام، تقریب هم‌محلی متناهی به کار برده می‌شود و از استنسیل سمت چپ در شکل ۱ استفاده خواهد شد. ابتدا مراحل گسسته‌سازی سمت راست معادله (۹)، در واقع مرحله k -ام، را شرح می‌دهیم و سپس گسسته‌سازی سمت چپ معادله (۹) را بیان می‌کنیم.



شکل ۱. ساختار استنسپل‌ها در یک دامنه مربعی

تقریب محلی متغیرهای میدانی u و v روی زیردامنه Ω_x به مرکز \mathbf{x}_c را بدین صورت در نظر می‌گیریم:

$$u_l^k(\mathbf{x}_c) = \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k,1} \varphi_i(\mathbf{x}) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}), \quad (10)$$

$$v_l^k(\mathbf{x}_c) = \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k,2} \varphi_i(\mathbf{x}) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k,2} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}), \quad (11)$$

تحت این شرایط

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_i) = 0, 1 \leq r \leq q,$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k,2} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_i) = 0, 1 \leq r \leq q,$$

که در آن $\lambda_{l,i}^{k,1}$ ، $\lambda_{l,i}^{k,2}$ ، $b_{l,r}^{k,1}$ و $b_{l,r}^{k,2}$ متغیرهای حقیقی هستند و r -امین جمله از چندجمله‌ای‌های مرتبه $Q-1$ است. تابع پایه‌ای شعاعی به کار رفته در این مقاله، تابع چندربعی است که بدین صورت تعریف می‌شود:

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = (\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2 + c^2)^{\frac{Q}{2}}, Q \in \mathbb{Z}^+$$

که در آن c یک ثابت است که به پارامتر شکل معروف است و پهنای نسبی تابع پایه‌ای شعاعی را نسبت به مرکزش، توصیف می‌کند. در این مقاله $c = 1/8$ فرض شده است. برای به دست آوردن مقادیر ضرایب $\lambda_{l,i}^{k,j}$ ، $j = 1, 2, i = 1, \dots, n$ ، ابتدا معادلات (۱۰) و (۱۱) را در تمامی نقاط $\mathbf{x}_i, i = 1, 2, \dots, n$ مربوط به استنسپل Ω_x هم‌محلی می‌کنیم. در واقع عملگر شرط دیریکله با مقدار جواب نامعین در این نقاط اعمال شده است و در این مقاله این نقاط را مراکز جواب می‌نامیم. در شکل ۱ دایره سیاه‌رنگ این نقاط را نشان می‌دهند. بنابراین دستگاه معادلات خطی (۱۲) را به دست می‌آوریم.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_l^k \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi & \mathbf{P}_{Q-1} \\ \mathbf{P}_{Q-1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_l^{k,1} \\ \mathbf{b}_l^{k,1} \end{bmatrix} = \mathbf{G} \tilde{\Lambda}_l^{k,1}, \quad (12)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{V}_l^k \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi & \mathbf{P}_{Q-1} \\ \mathbf{P}_{Q-1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_l^{k,2} \\ \mathbf{b}_l^{k,2} \end{bmatrix} = \mathbf{G} \tilde{\Lambda}_l^{k,2}, \quad (13)$$

که در آن داریم:

$$\mathbf{U}_l^k = [u_l(\mathbf{x}_1, k \Delta t), u_l(\mathbf{x}_2, k \Delta t), \dots, u_l(\mathbf{x}_n, k \Delta t)]^T,$$

$$\mathbf{V}_l^k = [v_l(\mathbf{x}_1, k \Delta t), v_l(\mathbf{x}_2, k \Delta t), \dots, v_l(\mathbf{x}_n, k \Delta t)]^T,$$

$$\Lambda_l^{k,1} = [\lambda_{l,1}^{k,1}, \lambda_{l,2}^{k,1}, \dots, \lambda_{l,n}^{k,1}]^T, \Lambda_l^{k,2} = [\lambda_{l,1}^{k,2}, \lambda_{l,2}^{k,2}, \dots, \lambda_{l,n}^{k,2}]^T, \mathbf{b}_l^{k,1} = [b_{l,1}^{k,1}, b_{l,2}^{k,1}, \dots, b_{l,q}^{k,1}]^T,$$

$$\mathbf{b}_l^{k,2} = [b_{l,1}^{k,2}, b_{l,2}^{k,2}, \dots, b_{l,q}^{k,2}]^T, \tilde{\Lambda}_l^{k,1} = \begin{bmatrix} \Lambda_l^{k,1} \\ \mathbf{b}_l^{k,1} \end{bmatrix}, \tilde{\Lambda}_l^{k,2} = \begin{bmatrix} \Lambda_l^{k,2} \\ \mathbf{b}_l^{k,2} \end{bmatrix},$$

و Φ ماتریس هم‌محلی است:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{x}_n) & \dots & \varphi_n(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}.$$

می‌توان نشان داد که ماتریس Φ وارون‌پذیر است اگر $c \neq 0$ و تمامی نقاط مجزا باشند [29]. ضرایب $\tilde{\Lambda}_l^{k,1}$ و $\tilde{\Lambda}_l^{k,2}$ را می‌توان بدین صورت نوشت

$$\tilde{\Lambda}_l^{k,1} = \mathbf{G}^{-1} \tilde{\mathbf{U}}_l^k \quad (14)$$

$$\tilde{\Lambda}_l^{k,2} = \mathbf{G}^{-1} \tilde{\mathbf{V}}_l^k, \quad (15)$$

که در آن داریم:

$$\tilde{\mathbf{U}}_l^k = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_l^k \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \tilde{\mathbf{V}}_l^k = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_l^k \\ 0 \end{bmatrix}$$

مقادیر متغیرهای میدانی u_l^k و v_l^k در هر نقطه $\mathbf{x} \in \Omega_x$ را می‌توان برحسب مقادیر سایر نقاط تقریب زد، یعنی:

$$u_l^k(\mathbf{x}) = \mathbf{J}^T(\mathbf{x}) \mathbf{G}^{-1} \tilde{\mathbf{U}}_l^k = \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k = \sum_{i=1}^n \psi_i(\mathbf{x}) u_{l,i}^k, \quad (16)$$

$$v_l^k(\mathbf{x}) = \mathbf{J}^T(\mathbf{x}) \mathbf{G}^{-1} \tilde{\mathbf{V}}_l^k = \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k = \sum_{i=1}^n \psi_i(\mathbf{x}) v_{l,i}^k. \quad (17)$$

که در آن

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = [\varphi_1(\mathbf{x}), \varphi_2(\mathbf{x}), \dots, \varphi_n(\mathbf{x}), p_{Q-1}^1, p_{Q-1}^2, \dots, p_{Q-1}^q]^T,$$

$$\Psi(\mathbf{x}) = \mathbf{J}^T(\mathbf{x}) \mathbf{G}^{-1} = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots, \psi_{n+q}]^T,$$

$$u_{l,i}^k = u_l(\mathbf{x}_i, k \Delta t) \quad \text{و} \quad v_{l,i}^k = v_l(\mathbf{x}_i, k \Delta t)$$

توابع $\psi_i, i=1, 2, \dots, n$ شکل نامیده می‌شوند. توجه شود که توابع شکل را می‌توان از حل این دستگاه به‌دست آورد:

$$\mathbf{G}^T \Psi^T(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x}). \quad (18)$$

در واقع مزیت حل دستگاه فوق این است که نیازی به محاسبه مستقیم ماتریس \mathbf{G}^{-1} نیست. مشتقات جزیی تابع Ψ را می‌توان بدین صورت نوشت.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial \psi_1}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial \psi_2}{\partial \mathbf{x}}, \dots, \frac{\partial \psi_{n+q}}{\partial \mathbf{x}} \right]^T = \frac{\partial \mathbf{J}^T(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{G}^{-1},$$

که در آن داریم:

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial \varphi_1}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial \varphi_2}{\partial \mathbf{x}}, \dots, \frac{\partial \varphi_n}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial p_{Q-1}^1}{\partial \mathbf{x}}, \dots, \frac{\partial p_{Q-1}^q}{\partial \mathbf{x}} \right]^T.$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$\frac{\partial u_l^k(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}\right)^T \tilde{\mathbf{U}}_l^k, \quad (19)$$

$$\frac{\partial v_l^k(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{x}}\right)^T \tilde{\mathbf{V}}_l^k. \quad (20)$$

همچنین مشتقات (اول یا مراتب بالاتر) نسبت به y را می توان به طریق مشابه به دست آورد. لازم به ذکر است در حالتی که نقاط به صورت منظم گسسته سازی شده باشند، وارون ماتریس محلی تنها یک بار محاسبه می شود و می توان در کل دامنه از آن استفاده کرد. از این رو، هزینه محاسباتی کاهش می یابد. از آن جاکه مقادیر متغیرهای میدانی در مرحله k -ام مشخص هستند، با استفاده از معادلات (۱۶) و (۱۷) سمت راست دستگاه (۹) را می توان بدین صورت تقریب زد:

$$\begin{aligned} E_l^k(\mathbf{x}) &= \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k - \frac{\Delta t}{2} \Delta \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k - \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}) \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}) ((\Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k)^2 - (\Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k)^2) \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k, \\ F_l^k(\mathbf{x}) &= \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k + \frac{\Delta t}{2} \Delta \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k + \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}) \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}) ((\Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k)^2 + (\Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{V}}_l^k)^2) \Psi^T(\mathbf{x}) \tilde{\mathbf{U}}_l^k; \end{aligned} \quad (21)$$

در معادله مذکور تمامی جملات بر حسب مقادیر نقاط در مرحله k -ام تقریب زده شده اند. بنابراین در زیردامنه محلی Ω_x به مرکز \mathbf{x}_c دستگاه (۹) برابر است با:

$$\begin{aligned} u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) &+ \frac{\Delta t}{2} \Delta v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}) v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}) (u_l^2(\mathbf{x}) + v_l^2(\mathbf{x}))^{k+1,m} v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) = E_l^k(\mathbf{x}), \\ v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) &- \frac{\Delta t}{2} \Delta u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}) u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) \\ &- \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}) (u_l^2(\mathbf{x}) + v_l^2(\mathbf{x}))^{k+1,m} u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) = F_l^k(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (22)$$

تاکنون تقریبی برای عبارت سمت راست دستگاه (۹) یافتیم. اکنون عبارت سمت چپ معادله (۲۲) را بر حسب متغیرهای میدانی u_l^{k+1} و v_l^{k+1} با فرض این که عبارت های $E_l^k(\mathbf{x})$ و $F_l^k(\mathbf{x})$ از (۲۱) معلوم هستند، بیان می کنیم. برای این منظور از ساختار استنسیل سمت چپ (یکی از استنسیل هایی که با شماره های ۱، ۲، ۳ و ۴ شماره گذاری شده اند) در شکل ۱ استفاده می کنیم. در این استنسیل، متغیرهای میدانی مانند زیر تقریب زده می شوند.

$$\begin{aligned} u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \varphi_i(\mathbf{x}) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}), \\ v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \varphi_i(\mathbf{x}) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (23)$$

در مرکز استنسیل، نقطه \mathbf{x}_c (نقطه ای که در شکل ۱ با علامت ستاره نشان داده شده است)، دستگاه (۲۲) اعمال می شود و این نقطه را مرکز معادله دیفرانسیل جزئی می نامیم. این نام گذاری به این دلیل است که عملگر معادله

دیفرانسیل جزئی در این نقطه اعمال شده است. همچنین این نقطه، مرکز نقاط محلی است (نقطه‌ای که اطراف آن استنسیل در نظر گرفته شده است) و نقطه‌ای است که برای آن در ماتریس پایانی معادله‌ای ساخته می‌شود. با هم‌محلی کردن دستگاه (۲۲) (معادله دیفرانسیل حاکم بر مسئله) در این نقطه و با جای‌گذاری (۲۳) در (۲۲) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) + \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \Delta \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \frac{\Delta t}{2} \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} \Delta p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \\ & + \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}_c) \left(\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} \Delta p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \right) \\ & + \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}_c) (u_l^2(\mathbf{x}_c) + v_l^2(\mathbf{x}_c))^{k+1,m} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} \Delta p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \right) = E_l^k(\mathbf{x}_c), \\ & \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) - \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \Delta \varphi_i(\mathbf{x}_c) - \frac{\Delta t}{2} \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} \Delta p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \\ & - \frac{\Delta t}{2} D(\mathbf{x}_c) \left(\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \right) \\ & - \frac{\Delta t}{2} C(\mathbf{x}_c) (u_l^2(\mathbf{x}_c) + v_l^2(\mathbf{x}_c))^{k+1,m} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \varphi_i(\mathbf{x}_c) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_c) \right) = F_l^k(\mathbf{x}_c), \end{aligned}$$

برای نقاطی که پیرامون استنسیل قرار گرفته‌اند و به $\partial\Omega$ تعلق ندارند (این نقاط محل جواب، \mathbf{x}_j ، نامیده می‌شوند) مقدار جواب نامعلوم (در واقع عملگر دیریکله با مقدار مجهول) مانند (۲۴) اعمال می‌شود:

$$\begin{aligned} u_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}_j) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} \varphi_i(\mathbf{x}_j) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_j), \\ v_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}_j) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} \varphi_i(\mathbf{x}_j) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_j). \end{aligned} \quad (24)$$

برای نقاطی که پیرامون استنسیل و روی $\partial\Omega$ قرار دارند (چنین نقاطی، نقاط مرزی، \mathbf{x}_d ، یا محل مرزی نامیده می‌شوند) که در شکل ۱ با مربع نشان داده شده‌اند، شرط مرزی متناظر (۳) یا (۴) مانند (۲۵) هم‌محلی می‌شود:

$$\begin{aligned} Bu_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}_d) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} B \varphi_i(\mathbf{x}_d) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} B p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_d), \\ Bv_l^{k+1,m+1}(\mathbf{x}_d) &= \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,2} B \varphi_i(\mathbf{x}_d) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,2} B p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_d), \end{aligned} \quad (25)$$

که در آن B نماد عملگری شرایط مرزی است. با کنار هم قرار دادن معادلات (۲۵)–(۲۱) تعداد N_1 دستگاه مربعی از مرتبه $2n$ مانند (۲۶) ساخته می‌شود:

$$\tilde{\Phi}_l \hat{\Lambda}_l^{k+1} = \mathbf{d}_l, \quad l = 1, 2, \dots, N_1, \quad (26)$$

که $\tilde{\Phi}_l$ ماتریس حاصل از هم‌محلی متناهی در نقاط استنسیل است.

حال ضرایب $\hat{\Lambda}_l^{k+1}$ را می‌توان از رابطه (۲۷) به دست آورد.

$$\tilde{\Lambda}_l^{k+1} = \tilde{\Phi}_l^{-1} \mathbf{d}_l. \quad (27)$$

با هم محلی کردن دستگاه (۲۳) در نقطه مرکز استنسیل \mathbf{x}_c ، به دست می آوریم:

$$\begin{bmatrix} u_l^{k+1}(\mathbf{x}_c) \\ v_l^{k+1}(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) & 0 \\ 0 & \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix} \hat{\mathbf{A}}_l^{k+1} \quad (28)$$

با جای گذاری (۲۷) در (۲۸) داریم:

$$\begin{bmatrix} u_l^{k+1}(\mathbf{x}_c) \\ v_l^{k+1}(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) & 0 \\ 0 & \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix} \tilde{\Phi}_l^{-1} \mathbf{d}_l = \mathbf{W}_l(\mathbf{x}_c) \mathbf{d}_l, \quad (29)$$

که تابع \mathbf{W}_l بدین صورت تعریف شده و وزن استنسیل متناظر نامیده می شود:

$$\mathbf{W}_l(\mathbf{x}_c) = \begin{bmatrix} \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) & 0 \\ 0 & \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix} \tilde{\Phi}_l^{-1}$$

توجه شود که وزن را می توان از حل دستگاه خطی زیر محاسبه کرد و نیازی به محاسبه وارون ماتریس نیست.

$$\tilde{\Phi}_l^T [\mathbf{W}_l(\mathbf{x}_c)]^T = \begin{bmatrix} \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) & 0 \\ 0 & \mathbf{J}^T(\mathbf{x}_c) \end{bmatrix}^T;$$

بنابراین با محاسبه دستگاه (۲۹) در نقطه مرکزی استنسیل محلی l -ام، یک معادله برای متغیر u و یک معادله برای متغیر v یافت می شود. بنابراین، هم زمان تعداد $2N_1$ معادله برای $2N_1$ مقادیر مجهول u و v تشکیل می شود. شرط مرزی دیریکله مستقیماً به ماتریس پایانی اضافه می شود. برای اعمال شرط مرزی نیومن، متناظر با هر نقطه مرزی نیومن یک استنسیل در نظر گرفته (برای مثال استنسیلی که با شماره ۱ و ۴ در شکل ۱ نام گذاری شده است) و شرط نیومن در این نقطه مرزی اعمال می شود. برای نقطه مرزی \mathbf{x}_d معادله زیر اعمال می شود.

$$Bu_l^{k+1}(\mathbf{x}_d) = \sum_{i=1}^n \lambda_{l,i}^{k+1,1} B \varphi_i(\mathbf{x}_d) + \sum_{r=1}^q b_{l,r}^{k+1,1} B p_{Q-1}^r(\mathbf{x}_d).$$

همانند رابطه مذکور برای متغیر $v^k(x, y)$ نیز می توان معادله ای نوشت. بنابراین با اعمال شرایط مرزی $2N_2$ معادله به دست می آوریم. با توجه به موارد بیان شده، با گرد هم قرار دادن $2N = 2N_1 + 2N_2$ معادله پایانی، دستگاه خطی زیر را داریم:

$$A \begin{bmatrix} U^{k+1} \\ V^{k+1} \end{bmatrix} = e.$$

در این دستگاه خطی، در هر سطر تعداد مؤلفه های غیر صفر ماتریس به دست آمده حداکثر برابر با تعداد نقاط در استنسیل متناظرش است بنابراین ماتریس به دست آمده تنک است.

۳. نتایج عددی

در این بخش پنج مثال عددی شامل معادله خطی و غیر خطی شرودینگر داده می شوند. برای اندازه گیری دقت جواب عددی از دو نوع خطای اندازه گیری استفاده می کنیم؛ نرم بی نهایت خطا و ریشه میانگین مربع خطا که بدین صورت تعریف می شوند:

$$\|e\|_{\infty} = \max\{|u_N(z_i) - u^*(z_i)|, \quad z_i \in Z\},$$

$$RMS = \left(\sum_{z_i \in Z} \frac{(u_N(z_i) - u^*(z_i))^2}{|Z|} \right)^{\frac{1}{2}},$$

که در آن‌ها u_N جواب تقریبی و u^* جواب دقیق و Z مجموعه نقاط ارزیاب و $|Z|$ نشان‌دهنده تعداد نقاط این مجموعه است. در تمامی جداول این مقاله، CN بیان‌کننده عدد شرطی ماتریس است.

۳-۱. مسائل خطی

۳-۱-۱ مثال ۱

به‌عنوان مثال اول، معادله ۱ را روی دامنه $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$ با $D = 0, C = 0$ و شرط اولیه زیر در نظر

می‌گیریم:

$$\psi(x, y, 0) = \exp(i(x + y)),$$

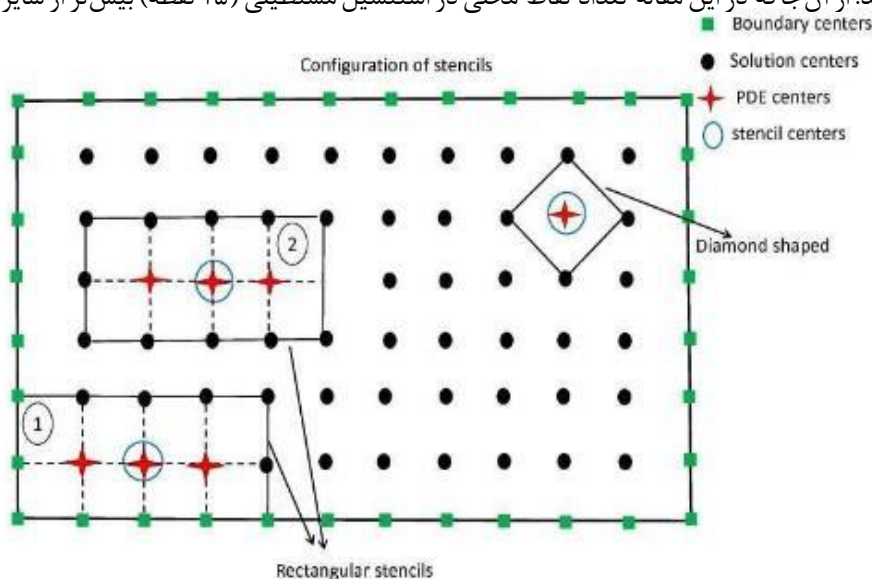
هم‌چنین شرط مرزی دیریکله روی کل دامنه از جواب تحلیلی زیر محاسبه می‌شود.

$$\psi(x, y, t) = \exp(i(x + y - 2t)).$$

این مسئله در [11] با روش بدون شبکه محلی پتروف گالرکین بررسی شده است. برای تحلیل حساسیت این روش، در این مقاله از استنسپل مربعی (3×3) ، مستطیلی (3×5) و استنسپل ۵ نقطه‌ای منظم را روی نقاط با فاصله منظم مانند شکل ۲، و استنسپل نامنظم روی نقاط نامنظم مانند شکل ۳ استفاده می‌کنیم.

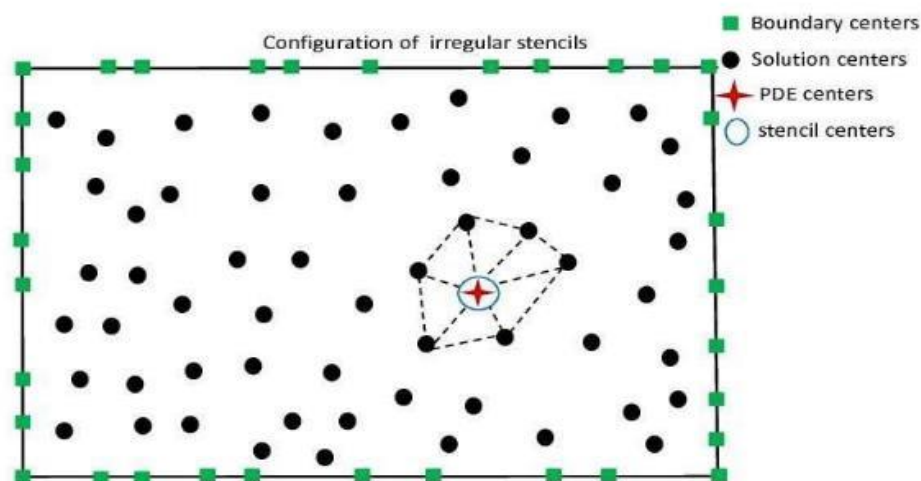
برای بررسی تأثیر پارامتر شکل C روی دقت جواب‌های عددی شکل ۴ ارائه شده است. این شکل با در نظر گرفتن

یک شبکه منظم 17^2 از نقاط، استنسپل مربعی و به‌ازای $\Delta t = 0.05$ به‌دست آمده است. این شکل $c = 1/8$ را پیشنهاد می‌دهد و این مقدار در تمامی مثال‌ها ثابت در نظر گرفته می‌شود. تأثیر استفاده از استنسپل‌های متفاوت بر دقت جواب‌های تقریبی در شکل ۵ نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد برای تعداد مقادیر کوچک نقاط محلی، استفاده از استنسپل مستطیلی دقت بهتری خواهد داشت در حالی که استفاده از استنسپل نامنظم روی شبکه تصادفی از نقاط دقت کم‌تری به‌همراه دارد. در تمامی روش‌های بدون شبکه، انتظار می‌رود استفاده از شبکه منظم دقت بهتری داشته باشد. از آن‌جاکه در این مقاله تعداد نقاط محلی در استنسپل مستطیلی (۱۵ نقطه) بیش‌تر از سایر استنسپل‌ها است.

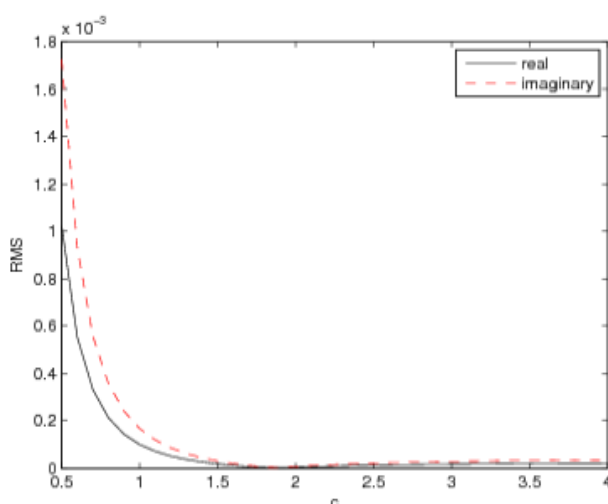


شکل ۲. نمایی از استنسپل‌های منظم در دامنه مربعی

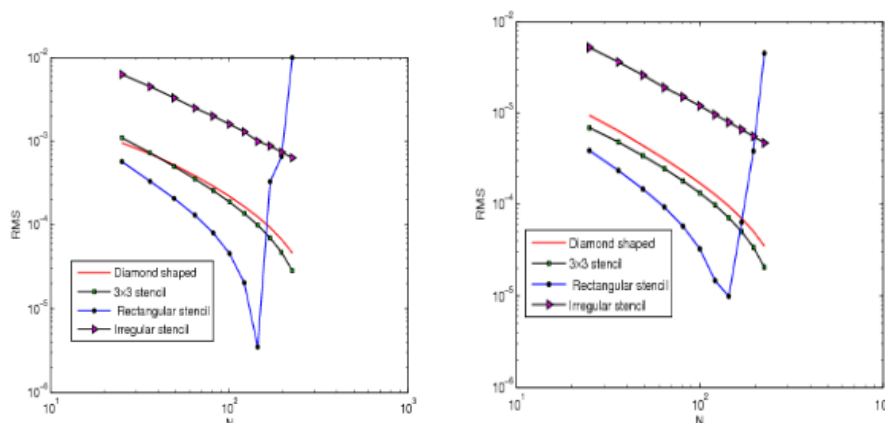
به کار بردن آن نتایج عددی بهتری در پی دارد. از طرفی با افزایش تعداد نقاط شبکه، به کارگیری استنسیل مستطیلی پایداری کمتری به همراه دارد؛ زیرا که تعداد مؤلفه‌های غیرصفر ماتریس پایانی افزایش می‌یابد. بنابراین در این مقاله استنسیل مربعی 3×3 را به کار می‌گیریم. برای نشان دادن همگرایی مکانی این روش و هم‌چنین برای انتخاب بهینه تعداد نقاط شبکه، جدول ۱ ارائه شده است. نتایج این جدول در لحظه $t = 5$ با به کار بردن تعداد نقاط مختلف، N ، و به ازای $\Delta t = 0.05$ به دست آمده‌اند. با بررسی ستون‌های جدول ۱ در می‌یابیم که با افزایش تعداد نقاط، دقت جواب افزایش می‌یابد؛ اما پس از $N = 17^2$ خطای گرد کردن و قطع کردن غلبه می‌یابد و دقت روش کاهش می‌یابد. از نتایج این جدول $h = 0.0625$ را برای محاسبات بعدی در نظر می‌گیریم [11]. میانگین مربع خطا و نرم بینهایت خطا در لحظه $t = 1$ به ازای مقادیر متفاوت Δt برای مثال ۱ در جدول ۲ نشان داده شده است. با بررسی ستون‌های این جدول این نتیجه حاصل می‌شود که با کاهش Δt دقت جواب افزایش می‌یابد اما پس از $\Delta t = 0.05$ خطای قطع کردن و گرد کردن بر نتایج عددی تاثیر گذاشته و باعث کاهش دقت جواب عددی می‌شود. این جدول $\Delta t = 0.05$ را پیشنهاد می‌دهد.



شکل ۳. نمایشی از استنسیل نامنظم در دامنه مربعی



شکل ۴. میانگین مربع خطا نسبت به تغییرات پارامتر شکل که در لحظه $t = 5$ ، با گام زمانی $\Delta t = 0.05$ و استنسیل مربعی برای مثال ۱ به دست آمده است.



شکل ۵. میانگین مربع خطا برای قسمت حقیقی (چپ) و موهومی (راست) نسبت به تعداد نقاط، با گام زمانی $\Delta t = 0.05$ ، $c = 1/8$ و $t = 1$ برای مثال ۱ به دست آمده است.

جدول ۱. نتایج به دست آمده در لحظه $t = 5$ به ازای $\Delta t = 0.05$ و تعداد نقاط متفاوت N برای مثال ۱

N	Real part		Imaginary part		CN
	RMS	$\ e\ _{\infty}$	RMS	$\ e\ _{\infty}$	
5^2	$3/6091 \times 10^{-4}$	$8/5726 \times 10^{-4}$	$9/1412 \times 10^{-4}$	$2/1000 \times 10^{-3}$	$3/4022$
6^2	$6/2233 \times 10^{-5}$	$1/3284 \times 10^{-4}$	$4/5588 \times 10^{-4}$	$1/0000 \times 10^{-3}$	$5/3295$
7^2	$7/1927 \times 10^{-5}$	$1/6751 \times 10^{-4}$	$2/3143 \times 10^{-4}$	$5/2570 \times 10^{-4}$	$7/6231$
11^2	$1/5133 \times 10^{-5}$	$4/4553 \times 10^{-5}$	$3/0669 \times 10^{-5}$	$7/9488 \times 10^{-5}$	$23/7859$
12^2	$8/8815 \times 10^{-6}$	$2/5060 \times 10^{-5}$	$1/9641 \times 10^{-5}$	$5/1456 \times 10^{-5}$	$29/124$
13^2	$4/6251 \times 10^{-6}$	$1/4084 \times 10^{-5}$	$1/2278 \times 10^{-5}$	$3/1683 \times 10^{-5}$	$35/0194$
14^2	$2/1788 \times 10^{-6}$	$7/1294 \times 10^{-6}$	$7/0421 \times 10^{-6}$	$1/7327 \times 10^{-5}$	$41/6304$
15^2	$8/4578 \times 10^{-7}$	$2/8843 \times 10^{-6}$	$3/2193 \times 10^{-6}$	$7/6893 \times 10^{-6}$	$48/1021$
16^2	$8/8457 \times 10^{-8}$	$2/7594 \times 10^{-7}$	$3/7327 \times 10^{-7}$	$8/5001 \times 10^{-7}$	$55/4893$
17^2	$3/5751 \times 10^{-8}$	$9/3521 \times 10^{-8}$	$1/5408 \times 10^{-7}$	$3/4033 \times 10^{-7}$	$63/4194$
18^2	$4/2221 \times 10^{-7}$	$1/2120 \times 10^{-6}$	$1/8086 \times 10^{-6}$	$3/9032 \times 10^{-6}$	$71/6959$
19^2	$8/0723 \times 10^{-7}$	$2/5067 \times 10^{-6}$	$3/3675 \times 10^{-6}$	$7/1795 \times 10^{-6}$	$80/5800$
20^2	$1/1476 \times 10^{-6}$	$3/7071 \times 10^{-6}$	$4/6317 \times 10^{-6}$	$9/8566 \times 10^{-6}$	$89/2473$

۳-۲. مثال ۲: شرایط مرزی آمیخته

معادله (۱) با $C = 0$ ، تابع پتانسیل $D(x, y) = 3 - 2 \tanh^2 x - 2 \tanh^2 y$ و شرط اولیه

$$\psi(x, y, 0) = \frac{i}{\cosh x \cosh y},$$

را روی مربع واحد $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$ به همراه شرایط مرزی آمیخته زیر در نظر می‌گیریم:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \psi(1, y, t) = \frac{i \exp(it)}{\cosh 1 \cosh y} & 0 \leq y \leq 1, \\ \psi(x, 1, t) = \frac{i \exp(it)}{\cosh x \cosh 1} & 0 \leq x \leq 1, \\ \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 & x = 0, 0 \leq y \leq 1, \\ \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 & y = 0, 0 \leq x \leq 1, \end{array} \right.$$

جواب تحلیلی این معادله برابر است با [31]-[33]:

$$\psi(x, y, t) = \frac{i \exp(it)}{\cosh x \cosh y}.$$

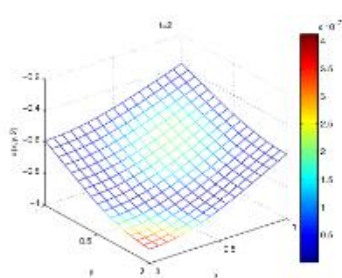
جدول ۳ میانگین مربع خطا و نرم بینهایت خطای قسمت‌های حقیقی و موهومی جواب تقریبی را در زمان‌های متفاوت نشان می‌دهد. در اینجا تفاوت چشم‌گیری بین نتایج عددی این روش و روش‌های موجود در مقاله‌های [۳۱ و ۱۱] دیده می‌شود. جواب‌های تقریبی در لحظات $t = 2$ ، $t = 3$ و $t = 5$ همراه با نمایش توزیع خطا در شکل ۶ نشان داده شده است. شکل ۷ طرح کانتور جواب‌های تحلیلی و تقریبی را در سه زمان مذکور نشان می‌دهد.

جدول ۲. نتایج عددی به دست آمده در لحظه $t = 1$ با Δt متفاوت و به ازای $N = 17^2$ و با بکاربردن استنسیل مربعی برای مثال ۱

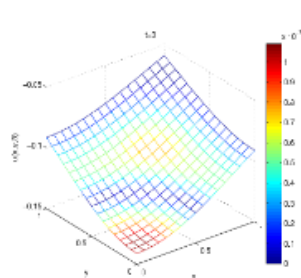
Δt	Real part		Imaginary part	
	RMS	$\ e\ _{\infty}$	RMS	$\ e\ _{\infty}$
0/20	$1/4000 \times 10^{-3}$	$3/0000 \times 10^{-3}$	$1/5000 \times 10^{-3}$	$3/1000 \times 10^{-3}$
0/10	$2/0385 \times 10^{-4}$	$4/5842 \times 10^{-4}$	$3/8449 \times 10^{-5}$	$1/0272 \times 10^{-4}$
0/05	$2/8653 \times 10^{-7}$	$5/7508 \times 10^{-7}$	$1/1030 \times 10^{-6}$	$2/3877 \times 10^{-6}$
0/025	$2/1424 \times 10^{-5}$	$5/3429 \times 10^{-5}$	$6/6814 \times 10^{-5}$	$1/3985 \times 10^{-4}$
0/0125	$2/9093 \times 10^{-5}$	$7/2880 \times 10^{-5}$	$6/7516 \times 10^{-5}$	$1/3431 \times 10^{-4}$
0/005	$3/4002 \times 10^{-5}$	$8/1423 \times 10^{-5}$	$6/4988 \times 10^{-5}$	$1/3275 \times 10^{-4}$

جدول ۳. نتایج عددی به دست آمده در لحظات مختلف زمانی به ازای $\Delta t = 0.5$ و $N = 17^2$ برای مثال ۲

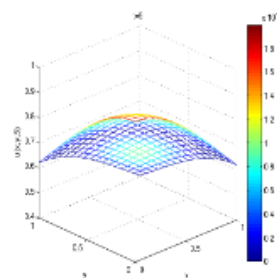
	Real part		Imaginary part	
	RMS	$\ e\ _{\infty}$	RMS	$\ e\ _{\infty}$
0/5	$8/6312 \times 10^{-7}$	$1/2094 \times 10^{-6}$	$7/6102 \times 10^{-6}$	$2/4710 \times 10^{-5}$
1	$7/1230 \times 10^{-6}$	$2/3021 \times 10^{-5}$	$1/3320 \times 10^{-6}$	$9/6577 \times 10^{-6}$
2	$8/2968 \times 10^{-6}$	$3/9012 \times 10^{-5}$	$7/6589 \times 10^{-6}$	$1/3255 \times 10^{-5}$
3	$2/7455 \times 10^{-5}$	$5/1524 \times 10^{-5}$	$2/9481 \times 10^{-5}$	$4/3165 \times 10^{-5}$
4	$3/3939 \times 10^{-5}$	$7/6610 \times 10^{-5}$	$4/3099 \times 10^{-5}$	$7/0921 \times 10^{-5}$
5	$6/1044 \times 10^{-5}$	$8/5777 \times 10^{-5}$	$5/1021 \times 10^{-5}$	$7/8232 \times 10^{-5}$
6	$8/7996 \times 10^{-5}$	$1/2255 \times 10^{-4}$	$6/1243 \times 10^{-5}$	$9/1047 \times 10^{-5}$
7	$9/2466 \times 10^{-5}$	$3/3261 \times 10^{-4}$	$8/8485 \times 10^{-5}$	$1/0146 \times 10^{-4}$



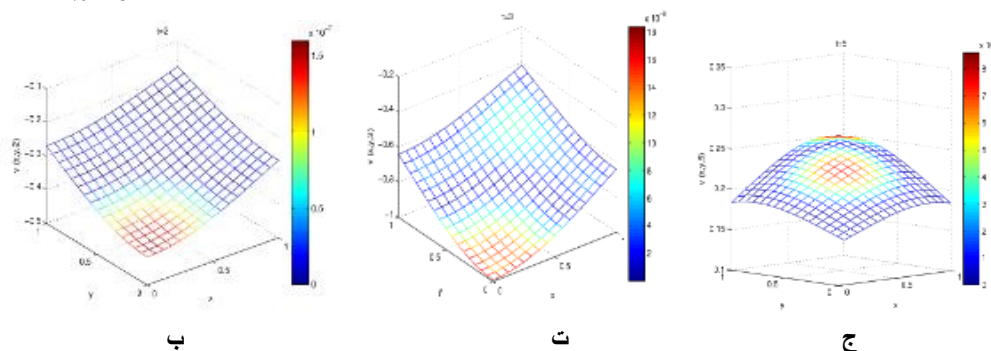
آ



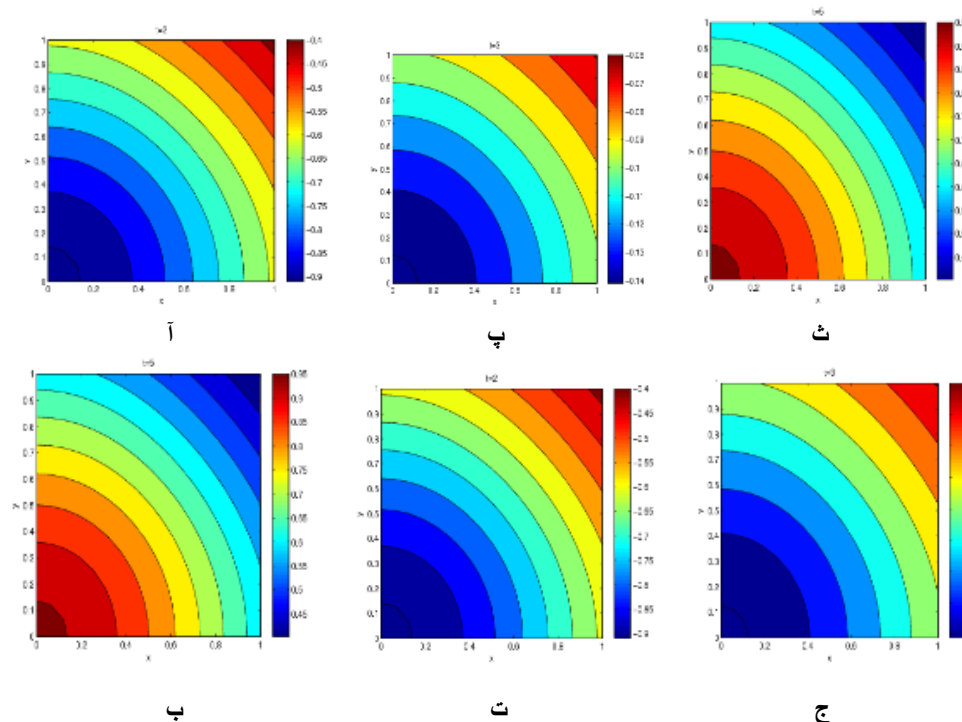
ب



ث



شکل ۶. قسمت‌های حقیقی و موهومی جواب تقریبی برای مثال ۲ همراه با نمایش خطا به فرم ستون رنگی، (آ) حقیقی در $t=2$ (ب، موهومی در $t=2$ (پ) حقیقی در $t=3$ (ژ) موهومی در $t=3$ (ث) حقیقی در $t=5$ (ج) موهومی در $t=5$



شکل ۷. طرح کانتور جواب‌های دقیق و عددی برای مثال ۲. (آ) تقریبی در $t=2$ (ب) دقیق در $t=2$ (پ) تقریبی در $t=3$ (ت) دقیق در $t=3$ (ث) تقریبی در $t=5$ (ج) دقیق در $t=5$

۲-۳ مسائل غیرخطی

۱-۲-۳ مثال ۳

معادله غیرخطی (۱) را با دامنه $0 \leq x, y \leq 1$ و تابع پتانسیل

$$D(x, y) = -(1 - 2\pi^2)(1 - \cos^2(\pi x)\cos^2(\pi y)), \quad C(x, y) = -(1 - 2\pi^2),$$

را در نظر می‌گیریم. جواب دقیق این مسئله بدین صورت است [14], [31]:

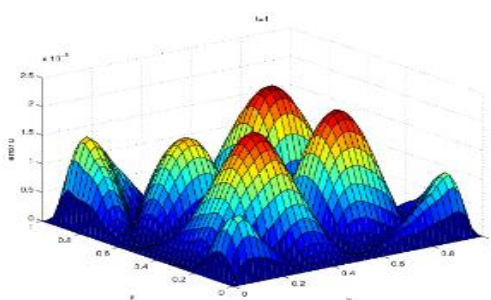
$$\psi(x, y, t) = \exp(-it) \cos(\pi x) \cos(\pi y).$$

این مسئله غیرخطی است و چنان‌که در بخش ۲ اشاره شد، یک تقریب تکراری برای خطی‌سازی آن به کار برده می‌شود. نتایج عددی به‌ازای تعداد تکرارها در هر گام زمانی در جدول ۴ ارائه شده است. با بررسی نتایج این جدول درمی‌یابیم که تنها یک تکرار در هر گام زمانی کافی است و در تعداد تکرارهای بیش‌تر خطای گردکردن و قطع کردن

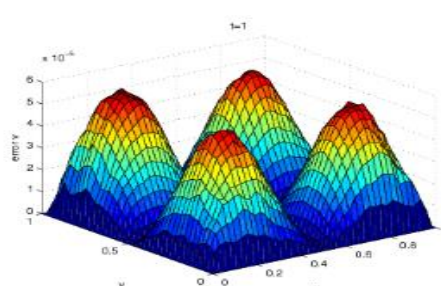
تأثیر بیش‌تری روی دقت جواب دارند. شکل ۸ خطای ریشه میانگین مربع جواب تقریبی در لحظات $t = 1$ و $t = 2$ را نشان می‌دهد.

جدول ۴. نتایج عددی در لحظه $t = 1$ به ازای $\Delta t = 0.5$ و تعداد تکرارهای متفاوت m برای مثال ۳

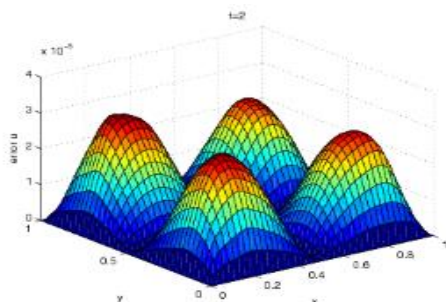
m	حقیقی		موهومی	
	RMS	$\ e\ _{\infty}$	RMS	$\ e\ _{\infty}$
0/5	$6/8064 \times 10^{-6}$	$1/5273 \times 10^{-5}$	$1/1282 \times 10^{-5}$	$2/4318 \times 10^{-5}$
1	$4/3674 \times 10^{-6}$	$1/1809 \times 10^{-5}$	$1/0587 \times 10^{-5}$	$2/3266 \times 10^{-5}$
2	$6/5073 \times 10^{-6}$	$1/6647 \times 10^{-5}$	$1/0325 \times 10^{-5}$	$2/3028 \times 10^{-5}$



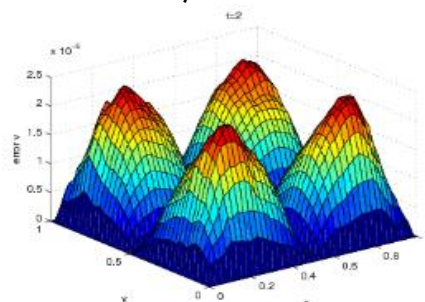
آ



ب



پ



ت

شکل ۸. خطای جواب عددی برای قسمت حقیقی (چپ) و موهومی (راست) در زمان‌های متفاوت برای مثال ۴. آ) قسمت حقیقی در $t = 1$ ، ب) قسمت حقیقی در $t = 2$ ، پ) قسمت موهومی در $t = 1$ ، ت) قسمت موهومی در $t = 2$.

۳-۲-۲ مثال ۴

معادله (۱) را با دامنه $0 \leq x, y \leq \pi$ و این تابع پتانسیل را در نظر می‌گیریم:

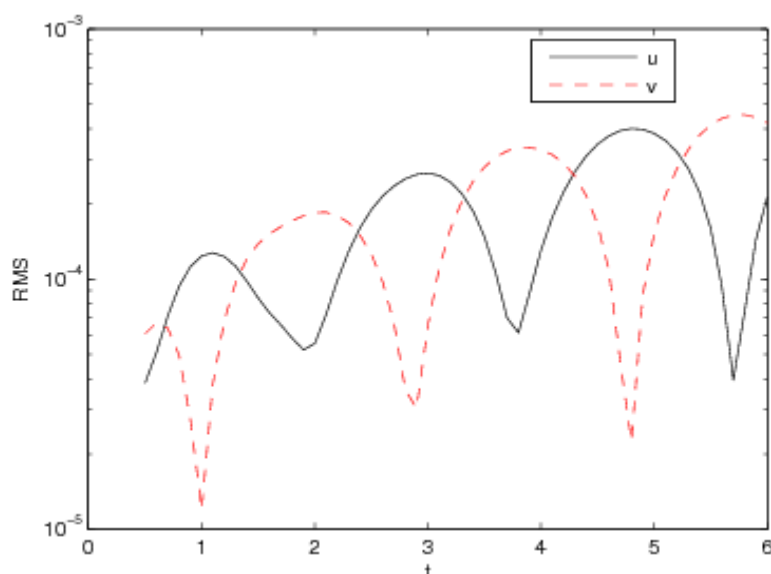
$$D(x, y) = 0, \quad C(x, y) = 1,$$

فرض کنیم شرایط اولیه و مرزی دیریکله از این جواب تحلیلی داده شده‌اند:

$$\psi(x, y, t) = A e^{i(k_1 x + k_2 y - \beta t)}, \quad \beta = k_1^2 + k_2^2 - |A|^2,$$

که در آن داریم $A = \frac{1}{2}, k_1 = k_2 = 1$ این مسئله در [14] بررسی شده است. میانگین مربع خطا در لحظات مختلف t

در شکل ۹ نشان داده شده است. این نتایج با یک شبکه $N = 51 \times 51$ از نقاط به دست آمده است.



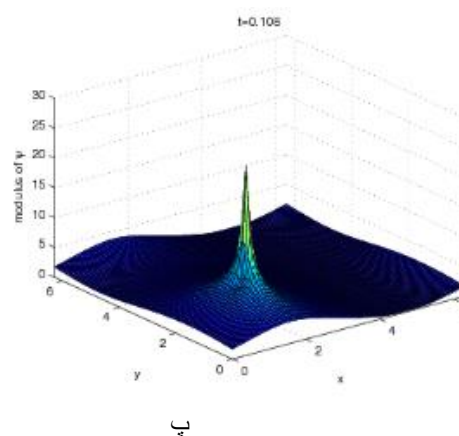
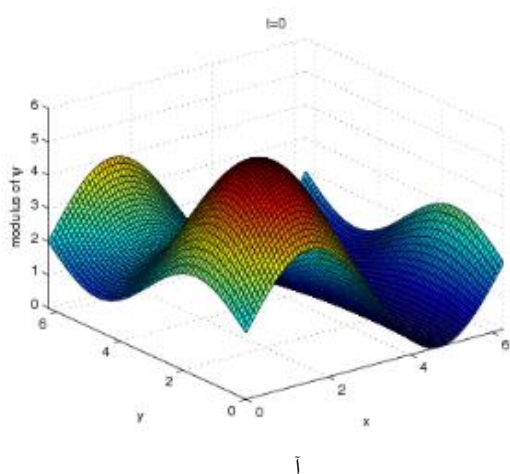
شکل ۹. خطای جواب عددی نسبت به زمان برای مثال ۴

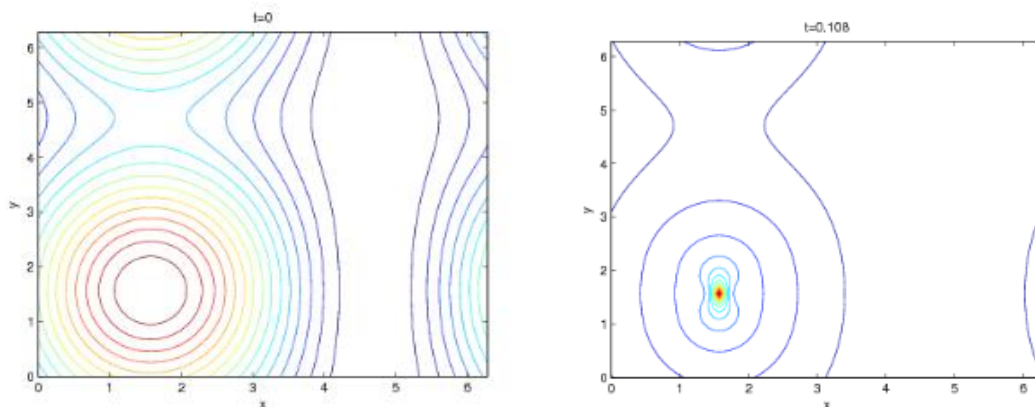
۳-۲-۳. مثال ۵: بررسی یک مسئله غیرخطی با شرایط مرزی متناوب

به عنوان مثال آخر، مسئله‌ای که در [7] آمده و جواب واقعی آن نامعلوم است را در نظر می‌گیریم. در معادله (۱) قرار می‌دهیم، $C(x, y) = 1$, $D(x, y) = 0$ و شرایط مرزی متناوب و شرط اولیه زیر را در نظر می‌گیریم:

$$\psi(x, y, 0) = (1 + \sin(x))(2 + \sin(y))$$

نتایج نشان می‌دهند که جواب این مسئله یک نقطه تکین در زمان متناهی دارد که در شکل ۱۰ نشان داده شده است. نتایج این روش با مقاله [7] مطابقت دارند.





ب

ت

شکل ۱۰. نمایش جواب آغازین (سمت چپ) و نقطه تکین جواب در $t = 0.108$ (سمت راست) برای مثال ۵. (آ و پ) نمایش جواب و (ب و ت) طرح کانتور متناظر جواب بالایی

۴. نتیجه گیری

چنان که ملاحظه شد یک روش بدون شبکه محلی به صورت قوی برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان دو بعدی داده شد. دو مسئله خطی و سه مسئله غیرخطی با این روش آزموده شدند. اگرچه برای حذف متغیر زمان، روش تفاضل متناهی θ به کار برده شد؛ اما به عنوان پیشنهاد برای خوانندگان علاقه مند، شاید بتوان با استفاده از روش تفاضلات متناهی فشرده دقت را افزایش داد. از آن جا که روش داده شده یک روش محلی است، اصلی ترین مزیت این روش خوش وضع بودن ماتریس پایانی است. بنابراین به کارگیری این روش برای تقریب برخی معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی که در علوم و مهندسی پر کاربرد هستند، و همچنین بررسی مسایل معکوس، می تواند کارا باشد.

تشکر و قدردانی

نویسندگان مقاله از سردبیر و داوران گرامی به دلیل بررسی دقیق مقاله و ارائه نظرات مفید که باعث ارتقای کیفی مقاله شد، سپاس گذاری می کنیم.

منابع

1. Torres-Vega G., Frederick J., "Quantum mechanics in phase space: New approaches to the correspondence principle", Chem. Phys, 93 (12) (1990) 8862-8874.
2. Jazbi B., Moini M., "On the numerical solution of one dimensional Schrödinger equation with boundary conditions involving fractional differential operators", IUST International Journal of Engineering Science, 19 (2008) 21-26.
3. Bourgain J., "Global solution of nonlinear Schrödinger equations", Amer. Math. Soc. Colloq. Publ., (1999).
4. Sulem C., Sulem P. L., "The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse", Springer, New York, (1999).

5. Sulem P. L., Sulem C., Patera A., "Numerical Simulation of Singular Solutions to the Two-Dimensional Cubic Schrödinger Equation", *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 37 (1984) 755-778.
6. Sacchetti A., "Nonlinear time-dependent Schrödinger equations: The Gross-Pitaevskii equation with double-well potential", *Evol. Equ.*, 4 (2004) 345-369.
7. Gao Z., Xie S., "Fourth-order alternating direction implicit compact finite difference schemes for two-dimensional Schrödinger equations", *Applied Numerical Mathematics*, 61 (4) (2011) 593-614.
8. Bao W., Shen J., "A fourth-order time-splitting Lagurre-Hermite pseudo-spectral method for Bose Einstein condensates", *SIAM. Sci. Comput.*, 26 (2005) 2010-2028.
9. Kalita J., Chhabra P., Kumar S., "A semi-discrete higher order compact scheme for the unsteady two-dimensional Schrödinger equation", *Computational Applied Mathematics*, 197 (2006) 141-149.
10. Xie S., Li G., Yi S., "Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 198 (2009) 1052-1060.
11. Dehghan M., Mirzaei D., "Numerical solution to the unsteady two-dimensional Schrödinger equation using meshless local boundary integral equation method", *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 76 (2008) 501-520.
12. Dehghan M., Taleei A., "A chebyshev pseudospectral multidomain method for the soliton solution of coupled nonlinear Schrödinger equations", *Computer Physics Communications*, 182 (12) (2011) 2519-2529.
13. Mohebbi A., Dehghan M., "The use of compact boundary value method for the solution of two-dimensional Schrödinger equation", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 225 (1) (2009) 124 -134.
14. Abbasbandy S., Ghehsareh H. R., Hashim I., "A meshfree method for the solution of two-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equation", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 37 (6) (2013) 885-898.
15. Ismail M., "Numerical solution of coupled nonlinear Schrödinger equation by Galerkin method", *Mathematics and Computers in Simulation*, 78 (4) (2008) 532-547.
16. Xu Y., Zhang L., "Alternating direction implicit method for solving two-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equation", *Computer Physics Communications*, 183 (5) (2012) 1082-1093.
17. Abbasbandy S., Shirzadi A., "MLPG method for two-dimensional diffusion equation with

- Neumann's and non-classical boundary conditions", *Appl. Numer. Math.*, 61 (2011) 170-180.
18. Abbasbandy S., Sladek V., Shirzadi A., Sladek J., "Numerical simulations for coupled pair of diffusion equations by MLPG method", *CMES Compt. Model. Eng. Sci.*, 71 (1) (2011) 15-37.
 19. Shirzadi A., Ling L., "Convergent overdetermined-RBF-MLPG for solving second order elliptic PDEs", *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 5 (1) (2013) 78-89.
 20. Shirzadi A., Sladek V., Sladek J., "A local integral equation formulation to solve coupled nonlinear reaction-diffusion equations by using moving least square approximation", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 37 (1) (2013) 8-14.
 21. Shirzadi A., Ling L., Abbasbandy S., "Meshless simulations of the two-dimensional fractional-time convection-diffusion-reaction equations", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 36 (2012) 1522-1527.
 22. Shirzadi A., Sladek V., Sladek J., "A meshless simulations for 2d nonlinear reaction-diffusion brusselator system", *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 95 (4) (2013) 259-282.
 23. Shirzadi A., "Numerical simulations of 1D inverse heat conduction problems using over-determined RBF-MLPG method", *Communications in Numerical Analysis*, (2013).
 24. Shirzadi A., "Meshless local integral equations formulation for the 2D convection- diffusion equations with a nonlocal boundary condition", *Computer Modeling in Engineering & Sciences (CMES)*, 85 (1) (2012) 45-63.
 25. Rad J. A., Parand K., Abbasbandy S., "Local weak form meshless techniques based on the radial point interpolation (RPI) method and local boundary integral equation (LBIE) method to evaluate european and american options", *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 22 (13) (2015) 1178-1200.
 26. Shirzadi A., Takhtabnoos F., "A local meshless collocation method for solving Landau Lifschitz -Gilbert equation", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 61 (2015) 104-113.
 27. Shirzadi A., Takhtabnoos F., "A local meshless method for cauchy problem of elliptic pdes in annulus domains", *Inverse Problems in Science and Engineering*, 0 (0) (2015) 1-15.
URL <http://dx.doi.org/10.1080/17415977.2015.1061521>
 28. Shirzadi A., "Numerical solutions of 3D cauchy problems of elliptic operators in cylindrical domain using local weak equations and radial basis functions", *International Journal of Computer Mathematics*, 0 (0) (0) 1-11.

URL <http://dx.doi.org/10.1080/00207160.2015.1104305>.

29. Lee C. K., Liu X., Fan S. C., "Local multiquadric approximation for solving boundary value problems", *Computational Mechanics*, 30 (2003) 396-409.
30. Stevens D., Power H., Meng C., Howard D., Cliffe K., "An alternative local collocation strategy for high-convergence meshless PDE solutions, using radial basis functions", *Journal of Computational Physics*, 254 (0) (2013) 52-75.
31. Cai X., Sun X., Li Z., Ji G., Lu J., "The Element-Free Galerkin Method for Two-dimensional Schrödinger Equation", *Procedia Engineering*, 31 (0) (2012) 1108-1114, international Conference on Advances in Computational Modeling and Simulation.
32. Dehghan M., "Finite difference procedures for solving a problem arising in modeling and design of certain optoelectronic devices", *Mathematics and Computers in Simulation*, 71 (1) (2006) 16-30.
33. Dehghan M., Shokri A., "A numerical method for two-dimensional Schrödinger equation using collocation and radial basis functions", *Computers & Mathematics with Applications*, 54 (1) (2007) 136-146.