

İSTANBUL KÜLTÜR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KİSMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN LİNEER
SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN SAYISAL ÇÖZÜMLERİ

DOKTORA TEZİ

Neslihan Fatma ER

1009242001

Anabilim Dalı: Matematik - Bilgisayar

Program: Matematik

MAYIS 2015

KİSMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN LİNEER
SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN SAYISAL ÇÖZÜMLERİ

DOKTORA TEZİ

Neslihan Fatma ER

1009242001

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 22.04.2015

Tezin Savunulduğu Tarih : 27.05.2015

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. S. Hikmet ÇAĞLAR (İ.K.Ü.)

Diğer Jüri Üyeleri: Doç. Dr. R. Tunç MISIRLIOĞLU (İ.K.Ü.)

Doç. Dr. Coşkun GÜLER (Y.T.Ü.)

Yrd. Doç. Dr. Yaşar POLATOĞLU (İ.K.Ü.)

Yrd. Doç. Dr. Selmahan SELİM (Y.T.Ü.)

MAYIS 2015

ÖNSÖZ

Bu doktora tez çalışması İstanbul Kültür Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik-Bilgisayar Ana Bilim Dalında Yrd. Doç. Dr. S. Hikmet ÇAĞLAR danışmanlığında gerçekleştirilmiştir. Ders aşamasında ve tez çalışmam boyunca beni daima akademik ve moral anlamda destekleyen, bilgi ve deneyimlerinden yaralandığım tez danışman hocam sayın Yrd. Doç. Dr. Hikmet ÇAĞLAR'a gönülden teşekkür ederim.

Tez çalışmam boyunca yaptıkları katkılardan dolayı tez izleme komite üyesi hocalarım sayın Yrd. Doç. Dr. Yaşar POLATOĞLU'na ve sayın Yrd. Doç. Dr. Selmahan SELİM'e de teşekkürlerimi sunarım.

Gerek doktora ders aşamasında gerekse tez çalışmam sırasında her zaman desteğini, güler yüzünü, sabrını esirgemeyen Arş. Gör. Dr. Canan AKKOYUNLU KAYA hayatım boyunca edindiğim en güzel arkadaşlarımdan biri olmuştur. Kendisine en içten teşekkürlerimi sunarken bana kattıklarını asla unutmayacağımı belirtmek isterim.

Doktora ders aşamasından itibaren üzerimde emeği olan tüm hocalarıma, arkadaşlarıma ve Yrd. Doç. Dr. Fatih UÇAR'a da verdiği tüm destek ve yardımları için teşekkür ederim.

Son olarak, hayatımın başından bugüne değin sevgilerini ve her türlü desteklerini benden esirgemeyen varlık sebebim sevgili babacığım ve anneciğime, bana en zor ve sıkıntılı anlarımda sevgi, güç ve güven veren, hayatıma girdiğinden beri yaşadığım her zorlukta çözüme ulaşmamda anahtar rolü oynayan sevgili eşim sayın Yrd. Doç. Dr. Mustafa ER'e ve verdikleri ek sorumluluklara rağmen yardımcı ve destek olmak iyi niyetini gösteren evlatlarımla Burak ER ve Hakan ER'e gönülden teşekkür ederim.

MAYIS 2015

Neslihan Fatma ER

İÇİNDEKİLER

ŞEKİL LİSTESİ	viii
ÖZET	x
SUMMARY	xi
1 GİRİŞ	1
2 KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN DİFERANSİYEL DENKLEMLER	5
3 KESİRLİ HESAPLAMALARDA TEMEL KAVRAMLAR	8
3.1 KESİRLİ HESAPLAMALARDA KULLANILAN ÖZEL FONKSİYONLAR	8
3.1.1 Gamma Fonksiyonu	8
3.1.2 Beta Fonksiyonu	12
3.1.3 Mittag-Leffler Fonksiyonu	12
3.1.4 Wright Fonksiyonu	14
3.2 KESİRLİ TÜREV TANIMLARI	15
3.2.1 Grünwald - Letnikow Kesirli Türevi	16
3.2.2 Riemann - Liouville Kesirli Türevi	16
3.2.3 Caputo Kesirli Türevi	17
3.2.4 Erdelyi-Kober Kesirli Türevi	20
3.2.5 Hadamard Kesirli Türevi	20
3.3 KESİRLİ TÜREVLERİN BAZI ÖZELLİKLERİ	21
3.3.1 Lineerlik	21
3.3.2 Homojenlik	21
3.3.3 Birleşme Özelliği	21
3.3.4 Kesirli Türevler için Leibniz Kuralı	22

3.3.5	Bileşik (Composite) Fonksiyonların Kesirli Türevleri	22
3.4	KESİRLİ DİFERANSİYEL HESABINDA KULLANILAN BAZI DÖNÜŞÜMLER	23
3.4.1	Laplace Dönüşümü ile İlgili Temel Bilgi	23
3.4.2	Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov Kesirli Türevlerinin Laplace Dönüşümü	23
3.4.3	Caputo Türevinin Laplace Dönüşümü	24
3.4.4	Fourier Dönüşümü ile İlgili Temel Bilgi	24
3.4.5	Kesirli Türevlerin Fourier Dönüşümü	25
4	KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİ	26
4.1	SCHRÖDİNGER DENKLEMİ	26
4.1.1	Max Planck'ın Kuantum Varsayımları	27
4.1.2	De Broglie Varsayımı	28
4.1.3	Heisenberg Belirsizlik İlkesi	28
4.1.4	Olasılık ve Yoğunluk Akısı	29
4.1.5	Kuantum Mekanikinin Postülatları	30
4.1.6	Zaman Bağımlı Schrödinger Denklemi	31
4.1.7	Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi	33
4.1.8	Relativistik Schrödinger Denklemi	34
4.1.9	Parçacığın İçinde Bulunduğu Potansiyelin Çözümüne Etkisi	34
4.2	SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN BAZI ÖZELLİKLERİ	35
4.3	DALGA FONKSİYONUNUN $\psi(X, T)$ YORUMU	36
4.4	KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİ	37
4.4.1	Zaman Bağımlı Kesirli Mertebeden Schrödinger Denklemi	37
4.4.2	Zaman Bağımsız Kesirli Mertebeden Schrödinger Denklemi	38
5	KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN MATEMATİKSEL MODELLENMESİ KONUSUNDA YAPILMIŞ ÇALIŞMALAR	40

6	SAYISAL YÖNTEMLER	44
6.1	KOMPAKT SONLU FARKLAR METODU	44
6.1.1	Kompakt Sonlu Farklar Metodu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar	44
6.1.2	Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Matematiksel Formülasyonu	46
6.2	ORTALAMA VEKTÖR ALANI (OVA) METODU (AVERAGE VECTOR FIELD - AVF)	51
6.2.1	Ortalama Vektör Alanı (OVA) Metodu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar	51
6.2.2	Ortalama Vektör Alanı (OVA) Metodu Formülasyonu . . .	53
7	SAYISAL ÖRNEKLER	57
7.1	KOMPAKT SONLU FARKLAR METODUNUN SAYISAL ÖRNEKLERE UYGULANMASI	57
7.1.1	Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Adi ve Kısmi Türevli Tamsayılı Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması	62
7.1.2	Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Kısmi Türevli Kesirli Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması	71
7.1.3	OVA Metodunun Kısmi Türevli Tamsayılı Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması	75
7.1.4	OVA Metodunun Kısmi Türevli Kesirli Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması	80
8	KİSMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN LİNEER SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ	83
8.1	KOMPAKT SONLU FARKLAR (KSF) METODU İLE ÇÖZÜMÜ	84
8.2	ORTALAMA VEKTÖR ALANI (OVA) METODU İLE ÇÖZÜMÜ	93
9	SAYISAL DAĞILIM BAĞINTILARI VE SONUÇLAR	100
9.1	DAĞILIM ANALİZİ	100

9.2	KİSMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖ- DİNGER DENKLEMİNE UYGULANAN KSF METODU İÇİN DAĞILIM ANALİZİ	101
9.3	KİSMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖ- DİNGER DENKLEMİNE UYGULANAN OVA METODU İÇİN DAĞILIM ANALİZİ	107
10	SONUÇ	111
	KAYNAKLAR	112
	ÖZGEÇMİŞ	125

ŞEKİL LİSTESİ

3.1	Gama Fonksiyonu Eğrisi	11
3.2	Farklı değerler için bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonları . .	13
3.3	Fonksiyonun 'geçmiş' ve 'gelecek' durumunu temsil eden sol ve sağ kesirli türevler	15
6.1	1-D N adet düğüm noktasının oluşturduğu ızgarada kompakt şemaların uygulaması	49
7.1	1-D N adet düğüm noktasının oluşturduğu ızgarada iç noktalar ve sınır kompakt şemaların uygulaması	59
7.2	Örnek 7.1 in $N = 21$ nokta için çözüm grafiği	63
7.3	Örnek 7.2 nin $N = 21$ nokta için çözüm grafiği	64
7.4	Örnek 7.3 ün $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği . . .	66
7.5	Örnek 7.4 ün $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği . . .	67
7.6	Örnek 7.5 in $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği	69
7.7	Örnek 7.6 nın $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği . . .	70
7.8	Örnek 7.7 nin $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği . . .	74
7.9	Örnek 7.9 un $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği	76
7.10	Örnek 7.10 un $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği	77
7.11	Örnek 7.11 in $N=121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği	78
7.12	Örnek 7.12 nin $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği	79
7.13	Örnek 7.13 ün $N=121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği	81
8.1	Problemin çözümünde eşitliğin solundaki katsayı matrisi (KSF) .	88
8.2	Problemin çözümünde eşitliğin sağındaki matris (KSF)	89
8.3	Problemin non-homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (KSF)	89
8.4	Problemin non-homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (KSF)	90

8.5	Problemin homojen durumda $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (KSF)	92
8.6	Problemin non-homojen durumda $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (KSF)	93
8.7	Problemin OVA ile çözümünde eşitliğin sağındaki matris	95
8.8	Problemin nonhomojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (OVA)	96
8.9	Problemin nonhomojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (OVA)	96
8.10	Homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait OVA metodu ile çözüm grafiği	99
8.11	Homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait OVA metodu ile çözüm grafiği	99
9.1	Probleme uygulanan KSF metodunun dağılım analizi için eşitlik (9.20) ve (9.33) ün karşılaştırılması	106
9.2	Probleme uygulanan OVA metodunun dağılım analizi için eşitlik (9.40) ve (9.48) in karşılaştırılması	110

Üniversitesi : İstanbul Kültür Üniversitesi
Enstitüsü : Fen Bilimleri
Anabilim Dalı : Matematik-Bilgisayar
Programı : Matematik
Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. S. Hikmet ÇAĞLAR
Tez Türü ve Tarihi : Doktora - Mayıs 2015

ÖZET

KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN LİNEER SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN SAYISAL ÇÖZÜMLERİ

Neslihan Fatma ER

Bu tezde kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden lineer Schrödinger denklemi ile ifade edilen problem ele alınmıştır. Problem, Caputo kesirli türev tanımının uygulanmasıyla tamsayı mertebeden lineer Schrödinger denklemi haline getirildikten sonra Kompakt Sonlu Farklar (KSF) ve Ortalama Vektör Alanı (OVA) metodları ile çözülmüştür. Tezde ayrıca uzay-kesirli mertebeden difüzyon denklemi de Caputo kesirli türev tanımının ardından KSF ve OVA metodları ile çözülmüştür. Ayrıca kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden lineer Schrödinger denkleminin uygulanan her iki metod için de dağılım analizi yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler : Kesirli mertebeden kısmi türevli Schrödinger denklemleri,
Caputo kesirli türev tanımı,
Kompakt sonlu farklar metodu,
Ortalama vektör alanı metodu,
Dağılım analizi.

Bilim Dalı Sayısal Kodu : 0924

University : İstanbul Kültür University
Institute : Institute of Science
Science Programme : Mathematics and Computer
Programme : Mathematics
Supervisor : Yrd. Doç. Dr. S. Hikmet ÇAĞLAR
Degree Awarded and Date : Ph.D. - May 2015

SUMMARY

NUMERICAL SOLUTIONS TO FRACTIONAL ORDER PARTIAL LINEAR SCHRÖDINGER EQUATIONS

Neslihan Fatma ER

In this thesis, a problem expressed as a time-fractional linear Schrödinger equation was handled to be solved. After transforming the fractional order SE into integer order SE by application of Caputo derivative definition, the problem was solved via Compact Finite Differences (CFD) and Average Vector Field (AVF) methods. Additionally, the problem in the form of space-fractional diffusion equation was solved via CFD and AVF methods after application of Caputo derivative definition, so it was indicated that CFD and AVF methods were applicable for space-fractional differential equations. Dispersion analysis for both methods were also carried out.

Keywords : Fractional order partial linear Schrödinger equations,
Caputo derivative definition,
Compact finite differences method,
Average vector field method,
Dispersion analysis.

Science Code : 0924

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Diferansiyel denklemler, cebir geometri, analiz problemleri gibi birçok problem, matematik diliyle ifade edilen birtakım denklemler ve kurallar yardımıyla çözümlürler. Ancak gezegen ve uydu hareketlerinin belirlenmesi, farklı ortamlarda ısıнын yayılması, elektrik devrelerinde yük ve akımın bulunması, radyoaktif maddelerin bozunması, kimyasal reaksiyonlarda hız, denge ve diğer özelliklerin incelenmesi, bazı geometrik özelliklere sahip eğrilerin bulunması, tel ve levha titreşimleri veya bir canlı topluluğunun nüfus artışı gibi fizik, kimya, biyoloji gibi temel bilim ve tüm mühendislik alanları ile sosyoloji ve işletme gibi sosyal bilimler alanlarındaki süreç özelliği gösteren birçok olayı açıklayan yasaların çoğu, bu olayların parçası olan bir veya daha fazla parametrenin, olayın diğer parametrelerine göre değişim hızlarını ve bu hızlar arasındaki ilişkileri içerir. Bu değişim hızları matematikte türevlerle ifade edilir.

Aslında bir süreç olan herhangi bir doğal veya sosyal olayın, diferansiyel denklemler yardımıyla tasvir edilmesi ya da başka bir deyişle matematiksel modellemesinin yapılabilmesi için bazı ön koşullar bulunmaktadır. Bunları aşağıdaki maddelerle özetlemek mümkündür.

1. Olay ölçülebilir bir zaman dilimi içinde belirli kurallara uygun olarak gelişiyor olmalıdır. Bu koşul, olayın evrimsel olması gerektiği şeklinde özetlenebilir.
2. Olay, sonlu sayıda parametre ile tanımlanabilir olmalıdır.

3. Olayın süreci diferansiyellenebilir fonksiyonlarla tanımlanabilir olmalıdır.
4. Olaya ait belli bir andaki veriler yardımıyla belirli bir zaman önceki veya sonraki durum, tek değerli olarak belirlenebilmeli, kısaca olay deterministik olmalıdır. Olay, quantum mekaniğinde taneciğin hareketi gibi stokastik veya yarı-stokastik olmamalıdır. Bu gibi durumlara ait matematiksel modellerde adi diferansiyel denklemler kullanılmaz.

Bu koşulları sağlayan bir olayı açıklayan bir yasa, olayın bileşeni olan farklı parametrelerin birbirlerine göre türevlerini (kısmi türev) ve olaya ait karakteristik fonksiyonları içeren matematiksel bağıntılar halinde ifade edilir. Bazı karakteristik fonksiyonlar ve bunların sonlu mertebeden türevlerini içeren matematiksel bağıntılara *diferansiyel denklem* denir [104]. Kısaca diferansiyel denklem; bazı bağımsız değişkenleri, bu değişken ya da değişkenlerin fonksiyonlarını ve bu fonksiyonların sonlu mertebeden türevlerini içeren denklemdir. Diferansiyel denklemdeki en yüksek mertebeden türevin mertebesine *diferansiyel denklemin mertebesi*, en yüksek mertebeli türevin kuvvetine *diferansiyel denklemin derecesi* denir [98].

Bir x değişkenine bağlı cebirsel veya deneysel bir denklemin çözümü, denklemin sağlayan bir sayı veya sayı kümesidir. Ancak, diferansiyel denklemlerin çözümleri, bir sayı değil, bu denklemin sağlayan fonksiyon ya da fonksiyonlardır. Bu sebeple diferansiyel denklemler, bir süreç özelliği taşıyan olayları tanımlamak, modellemek üzere kullanılır. Diferansiyel denklem, bir tek bağımsız değişkenin bilinmeyen fonksiyon veya fonksiyonlarını içeriyorsa *adi diferansiyel denklem* adını alır ve kapalı olarak $f(y', y'', \dots, y^n, y) = f(x)$ şeklinde gösterilir. Birden fazla bağımsız değişkenin bilinmeyen fonksiyon veya fonksiyonlarını içeriyorsa da *kısmi türevli diferansiyel denklem* adını alır ve kapalı olarak $f(x, y, z, z_x, z_y, z_{xx}, z_{yy}, \dots) = 0$ şeklinde gösterilir. Burada $z_x = dz/dx$, $z_y = dz/dy$, $z_{xx} = d^2z/dx^2$, $z_{xy} = d^2z/dxdy$, $z_{yy} = d^2z/dy^2$, ... dir.

Diferansiyel denklemleri birçok farklı özelliklerine göre sınıflandırmak mümkündür. Ancak bu çalışma kesirli mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklem tipleriyle ilgilidir. Çalışmada kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden lineer Sch-

rödinger denklemi problem olarak ele alınmış, Komkakt Sonlu Farklar (KSF) ve Ortalama Vektör Alanı (OVA) metodlarıyla çözülmüştür.

Yapılan çalışmalar doğrultusunda hazırlanan bu tez, birincisi giriş bölümü olmak üzere on bölümden oluşmaktadır.

İkinci bölümde, kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin kısaca tanımlanması ve yakın bilim tarihinde kesirli mertebeden diferansiyel denklem çözümleri için ortaya konulan pek çok metotdan bahsedilmektedir.

Üçüncü bölümde, kesirli hesaplamalarda kullanılan bazı kavramlar üzerinde durulmaktadır. Bu kapsamda bu bölümde; Gamma, Beta, Mittag-Leffler ve Wright fonksiyonları gibi kesirli hesaplamalarda kullanılan özel fonksiyonlardan bazıları kısaca ele alınmakta ve başlıcaları Grünwald-Letnikov, Riemann-Liouville, Caputo, Erdelyi-Kober ve Hadamard adlarıyla anılan kesirli türev tanımları verilmektedir. Ayrıca bazı özellikleri ile kesirli hesaplamalarda kullanılan bazı dönüşümler de bu bölümde kısaca ele alınmaktadır.

Dördüncü bölümde, Schrödinger denkleminin kuantum mekaniği içindeki bilşenleri ve bazı özelliklerinden bahsedildikten sonra zaman-bağımlı ve zaman-bağımsız kesirli mertebeden Schrödinger denklemleri üzerinde kısaca durulmaktadır.

Beşinci bölümde, kısmi türevli kesirli mertebeden Schrödinger denklemlerinin matematiksel modellemesi konusunda yapılmış çalışmalar hakkında bilgi verilmektedir.

Altıncı bölümde, bu tez çalışmasında uygulanan sayısal metodlar olan KSF ve OVA metodları hakkında yapılan literatür taramalarının sonuçları kısaca paylaşıldıktan sonra, bu metodların matematiksel formülasyonları ele alınmaktadır.

Yedinci bölümde, sırasıyla KSF ve OVA metodlarının sayısal örneklere uy-

gulanışı ayrıntılı olarak verilmektedir.

Sekizinci bölümde, zaman-kesirli mertebeden lineer Schrödinger denklemi olarak ifade edilen problemin, sırasıyla KSF ve OVA metodlarının uygulanması ile çözümü ayrıntılı olarak verilmektedir.

Dokuzuncu bölümde, her iki metod ile elde edilen sonuçlar dağılım analizleri yapılarak sayısal olarak değerlendirilmektedir.

Çalışmanın onuncu bölümünde ise bu tez çalışması ile bu alana yapılan katkı ve değerlendirmelerden bahsedilmektedir.

BÖLÜM 2

KİSMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN DİFERANSİYEL DENKLEMLER

1965'te Leibniz'in L'Hospital'a sorduğu "Tamsayı mertebeden türevler kesirli türevlere genelleştirilebilir mi?" anlamındaki " $\frac{d^n y}{dx^n}$ türevi $n = 1/2$ için ne ifade eder?" sorusunun, kesirli mertebeden türev ve integral teorilerinin doğumunu başlattığı kabul edilir. Leibniz bu soruya " $d^{1/2}x$ türevi $x\sqrt{dx} : x$ e eşit olacaktır. Bu açık bir paradokstur ve bir gün yararlı sonuçlar elde edilecektir." cevabından itibaren bu konunun üzerinde 300 yılı aşkın bir süredir çalışılmaktadır. Bu konu üzerinde çalışan matematikçilerden en bilinenleri olarak Liouville, Riemann, Weyl, Fourier, Caputo, Euler, Abel, Laplace, Lagrange, Kober, Erdelyi, Lacroix, Grönwald, Hadamard, Riesz ve Letnikov sayılabilir.

Kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemler ya da adi diferansiyel denklemler, onlarca yıldır mühendislik, temel bilimler, ekonomi gibi alanlardaki pek çok olayı tasvir etmek ve matematiksel olarak modellemek amacıyla kullanıldı [101]. Ancak kesirli diferansiyel denklemler son yıllarda matematiksel modellemelerde oldukça sık kullanılır oldu. Bunun nedeni kesirli mertebeden türevlerin gerçek sistem ve süreçleri, tamsayı mertebeli türevlere kıyasla daha tam ve gerçeğe yakın modellemesidir. Ancak buna rağmen tamsayı mertebeli diferansiyel denklemlerle oluşturulan modellerden daha doğru ya da daha kesin sonuç verdiklerini söylemek mümkün değildir. Adi ya da kısmi, tamsayı ya da kesirli mertebeden diferansiyel denklemler, özellikle son yıllarda sıvıların kimyasal analizi, ısı transferi, difüzyon, malzeme bilimi, visko-elastik yapılar, akışkanlar, frak-

tal süreçler, elektrokimya, Schrödinger denklemi gibi pek çok konuda uygulama alanı bulmuştur. Böyle pek çok alandaki matematiksel modellemelerde kullanıldıklarından, özellikle yakın bilim tarihinde kesirli mertebeden diferansiyel denklem çözümleri konusunda çalışılarak bir çok metot ortaya konulmuştur. Kesirli diferansiyel denklemlerin çözümlerinde en yaygın kullanılan metotlar arasında "Laplace Dönüşüm Metodu (Laplace Transformation Method)", "Sonlu Sinüs Dönüşüm Metodu (Finite Sine Transformation Method)", "Adomian Ayrıştırma Metodu (Adomian Decomposition Method)", "Kesirli Green Fonksiyonu Metodu (Fractional Green Function Method)" sayılabilir. Problemin türüne göre en uygun metot kullanılır.

Kısmi türevli diferansiyel denklem, bir bağımlı değişken ve bu bağımlı değişkenin farklı bağımsız değişkenlere göre türevlerini içeren denklemdir. Örneğin u bağımlı değişkeni x ve t bağımlı değişkenleri cinsinden $u = u(x, t)$ şeklinde tanımlanırsa, bu değişkenleri içeren kısmi türevli diferansiyel denklem genel olarak $F(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{tt}, u_{xt}, \dots) = 0$ şeklinde yazılabilir. F ile verilen bu bağıntıdaki türevlerden en az birinin mertebesi kesirli olduğunda, bu diferansiyel denklem *keyfi mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklem* adını alır. Bu tipteki diferansiyel denklemlere kısaca *kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemler* de denir. Örneğin;

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0 \quad \text{Kısmi türevli bir diferansiyel denklem iken}$$

$$\frac{\partial^{2.1} f}{\partial t^{2.1}} + \frac{\partial^{2.1} f}{\partial t^{2.1}} = 0 \quad \text{Kısmi türevli kesirli mertebeden bir diferansiyel denklemdir.}$$

$f(x, t)$ fonksiyonuna ait,

$$\dots \int_a^t dt_2 \int_a^{t_2} f(x, t) dt_1, \quad p \int_a^t f(x, t) dt, \quad pf(x, t), \quad p \frac{\partial f(x, t)}{\partial t}, \quad p \frac{\partial f^2(x, t)}{\partial t^2}, \dots$$

şeklinde gösterilen integral ve türevler olsun. Keyfi bir α mertebesinden alınan türev, yukarıda gösterilen türev, integral sıralaması içinde yapılacak bir interpolasyon olarak düşünülebilir. Keyfi mertebeden türev için bu çalışmada kullanıla-

çak notasyon, Davis tarafından önerilen ve kullanılan ${}_a D_t^\alpha f(x, t)$ notasyonudur. Bu notasyonda α kesirli diferansiyel mertebesi olmak üzere, a ve t indisleri kesirli diferansiyelleme operasyonunun limitlerini göstermektedir ve kesirli diferansiyelin *terminalleri* olarak adlandırılır. Bu terminallerin kesirli türev sembolünde gösterilmeleri çok önemlidir, çünkü kesirli türevlerin gerçek bir probleme uygulanışı sırasında belirsizlik durumlarını engellerler.

Kesirli integral için farklı bir gösterim genellikle kullanılmaz. α nın negatif değerleri için yapılan işlem kesirli integral olmaktadır. Ancak yine de kesirli integrali $\beta > 0$ koşuluyla ${}_a D_t^{-\beta} f(x, t)$ şeklinde kullanmak, daha az karışıklığa sebep olacaktır.

$F(x, y_1, y_2, \dots, y_n,)$ ve $g(x)$ fonksiyonları verildiğinde $a_k > 0$ koşuluyla reel sayı veya a_k kompleks bir sayı olmak üzere ve D^{α_k} kesirli türev operatörü kullanılarak kesirli adi diferansiyel denklemleri genel olarak

$$F(x, y(x), D^{\alpha_1} y(x), D^{\alpha_2} y(x), \dots, D^{\alpha_n} y(x)) = g(x) \quad (2.1)$$

şeklinde göstermek mümkündür [67]. Kesirli kısmi türevi de genel olarak aşağıdaki gibi göstermek mümkündür.

$$F(x, t, y(x, t), D_t^{\alpha_1} y(x, t), D_t^{\alpha_2} y(x, t), \dots, D_t^{\alpha_n} y(x, t)) = g(x) \quad (2.2)$$

$z = f(x, y, \dots, u)$ şeklinde bir fonksiyon, bir kısmi türevli diferansiyel denklemin çözümü olarak düşünülebilir. Bağımsız değişken sayısına bağlı olarak düşünülürse çözüm fonksiyonu, $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ şeklinde n adet bağımsız değişkeni olan bir fonksiyon da olabilir. n . mertebeden bir kısmi türevli diferansiyel denklemin analitik çözümü n tane keyfi fonksiyon içerir. Sayısal çözümü ise integral yüzeyi üzerindeki noktaların bulunmasıyla gerçekleşir.

BÖLÜM 3

KESİRLİ HESAPLAMALARDA TEMEL KAVRAMLAR

3.1 KESİRLİ HESAPLAMALARDA KULLANILAN ÖZEL FONKSİYONLAR

Keyfi mertebeden diferansiyel teorisi ve kesirli diferansiyel denklemlerin çözümünde çok önemli rolü olan bazı fonksiyonlar ve tanımlar bulunmaktadır. Bu bölümde bu konuya ait bu özel fonksiyon ve tanımlardan bazıları olan Gamma fonksiyonu, Beta fonksiyonu, Laplace dönüşümü, Mittag-Leffler fonksiyonu ve Wright fonksiyonu ele alınacaktır.

3.1.1 Gamma Fonksiyonu

Eulerin gamma fonksiyonu $\Gamma(Z)$ kesirli diferansiyel hesaplamalarında kullanılan temel bir fonksiyondur. Gamma fonksiyonu, $n!$ hesabındaki n sayısını, tam sayı olmayan sayılar ve hatta kompleks sayıları da içerecek şekilde genelleştirir. Gamma fonksiyonu $\Gamma(Z)$ eşitlik (3.1) de görülen integral ile tanımlanır [98].

$$\Gamma(z) = \int_0^w e^{-t} t^{z-1} dt, \quad z \in R \quad (3.1)$$

Gamma Fonksiyonunun Bazı Temel Özellikleri

Gamma fonksiyonunun temel özelliklerinden biri, aşağıdaki fonksiyonel eşitliği sağlamasıdır.

$$\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z), \quad z \in N_+ \quad (3.2)$$

$$\Gamma(z) = (z - 1)! \quad (3.3)$$

İspat:

$$\begin{aligned} \Gamma(z + 1) &= \int_0^\infty e^{-t} t^z dt \\ &= \left[-e^{-t} t^{z+zt^{z-1}e^{-t}} \right]_{t=0}^{t=\infty} \\ &= \left[-e^{-t} t^z \right]_{t=0}^{t=\infty} + z \int_0^\infty -e^{-t} t^{z-1} dt \\ \Gamma(z + 1) &= z\Gamma(z) \end{aligned}$$

Ayrıca $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ ve

$$\Gamma(x)\Gamma(1 - x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)} \quad (3.4)$$

özellikleri söylenebilir. Gamma fonksiyonunun diğer bir önemli özelliği de $z = -n$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) noktalarında basit kutupları olmasıdır. Gamma fonksiyonunun bu özelliğini göstermek için eşitlik (3.1) ile verilen tanım şöyle yazılır:

$$\Gamma(z) = \int_0^1 e^{-t} t^{z-1} dt + \int_1^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad (3.5)$$

Eşitlik (3.5) deki birinci integralin değeri üstel fonksiyonlar için seri açılımları kullanılarak belirlenebilir. Eğer $Re(z) = x > 0$ ise (bu, sağ yarı düzlemdeki z anlamına gelir), $Re(z + k) = x + n > 0$ ve $t_{t=0}^{z+k}$ olur. Bu nedenle, (3.5) deki birinci integral için aşağıdaki sonuç elde edilir.

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^{-t} t^{z-1} dt &= \int_0^1 \sum_{k=0}^\infty \frac{(-t)^k}{k!} t^{z-1} dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^1 t^{k+z-1} dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{(k+1)k!} \end{aligned}$$

Eşitlik (3.5) deki ikinci integral, z kompleks değişkenin tam bir fonksiyonunu tanımlamaktadır. Bu integral şöyle yazılır.

$$\varphi(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt = \int_0^{\infty} e^{(z-1)\log(t)-t} dt \quad (3.6)$$

$e^{(z-1)\log(t)-t}$ fonksiyonu, keyfi z ve $t \geq 1$ olan z ve t değişkenlerine bağlı, sürekli bir fonksiyondur. Hatta, $t \geq 1$ koşulu sağlandığında $\log(t) \geq 0$ olacağından z nin tam fonksiyonudur.

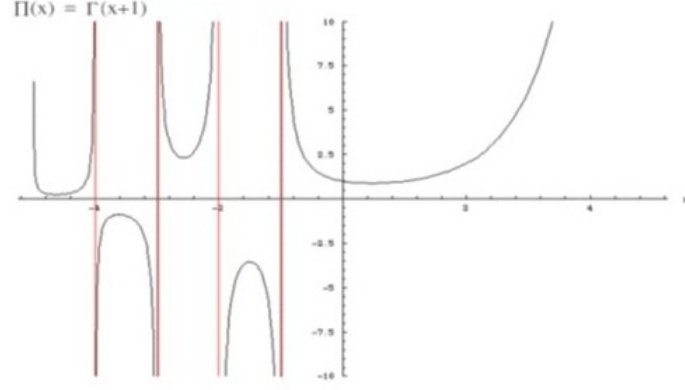
$z = x + iy$ gibi bir kompleks düzlemde, $x_0 = \max_{z \in D} \operatorname{Re}(z)$ olacak şekilde keyfi, sınırlı ve kapalı bir D bölgesi düşünülürse, aşağıdaki durum oluşur.

$$\begin{aligned} |e^{-t} t^{z-1}| &= |e^{(z-1)\log(t)-t}| \\ &= |e^{(x-1)\log(t)-t}| \cdot |e^{iy\log(t)}| \\ &= |e^{(x-1)\log(t)-t}| \leq e^{(x_0-1)\log(t)-t} \\ &= e^{-t} t^{(x_0-1)} \end{aligned}$$

Bu durum, (3.6) da gösterilen integralin D alanında düzgün yakınsak olduğunu gösterir. Bu yüzden $\varphi(z)$ fonksiyonu D alanında düzenlidir ve (3.6) daki integralin diferansiyellenebilme özelliği vardır. D alanı keyfi seçildiğinden dolayı, $\varphi(z)$ fonksiyonunun yukarıda gösterilen özelliklerinin tüm kompleks düzlemde geçerli olduğu sonucuna varılır. Bu yüzden $\varphi(z)$, bu integral altında diferansiyellenebilme izin veren bir tam fonksiyondur. Yukarıda bahsedilenler bir araya getirilirse, $\Gamma(z)$ şöyle yazılabilir:

$$\Gamma(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \cdot \frac{1}{k+z} + \int_1^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad (3.7)$$

Gamma fonksiyonu pozitif bölgede tanımlıdır, ancak negatif tamsayı değerlerinde sonsuza gitmektedir. Şekil 3.1 sıfır noktası civarında gamma fonksiyonunun davranışını göstermektedir.



Şekil 3.1: Gama Fonksiyonu Eğrisi

Gamma Fonksiyonunun Limit ile Gösterilmesi

Başlangıç olarak $Re(z) > 0$ kabulü altında, gamma fonksiyonu aşağıdaki gibi limit ile de gösterilebilir.

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^z}{z(z+1)\dots(z+n)} \quad (3.8)$$

İspat:

(3.8) ile verilen eşitliği elde etmek için (3.9) da gösterilen yardımcı fonksiyon kullanılır.

$$f_n(z) = n^z \int_0^n \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n t^{z-1} dt \quad (3.9)$$

$\tau = t/n$ kabulü yerine yazılır ve daha sonra kısmi integrasyon tekrar uygulanırsa, aşağıda gösterildiği şekilde denklem (3.10) elde edilir.

$$\begin{aligned} f_n &= n^z \int_0^1 (1 - \tau)^n \tau^{z-1} d\tau \\ &= \frac{n^z n}{z} \int_0^1 (1 - \tau)^{n-1} \tau^z d\tau \\ &= \frac{n^z n!}{z(z+1)\dots(z+n-1)} \int_0^1 \tau^{z+n-1} d\tau \end{aligned}$$

$$f_n = \frac{n^z n!}{z(z+1)\dots(z+n-1)(z+n)} \quad (3.10)$$

$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n = e^{-t}$ limiti kullanılırsa

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt = \Gamma(z) \quad (3.11)$$

elde edilir. Böylelikle, denklem (3.11) gamma fonksiyonunun limit ile de ifade edilebildiğini göstermektedir [98].

3.1.2 Beta Fonksiyonu

Birçok durumda gamma fonksiyonunun belirli kombinasyonlarını kullanmak gerekir. Ancak daha sonra bahsedilecek bu durumlarda, bu kombinasyonlar yerine beta fonksiyonu olarak adlandırılan bağıntının kullanılması daha uygundur. Beta fonksiyonu genellikle $\tau = \frac{t}{n}$ kabulü ve $Re(z) > 0$ ve $Re(w) > 0$ olmak üzere

$$B(z, w) = \int_0^1 \tau^{z-1} (1 - \tau)^{w-1} d\tau \quad (3.12)$$

şeklinde tanımlanır. Beta fonksiyonuna ait birçok özellik arasından en belirgin olanı ise şöyle verilir [7].

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p) \Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} = B(q, p) \quad (3.13)$$

3.1.3 Mittag-Leffler Fonksiyonu

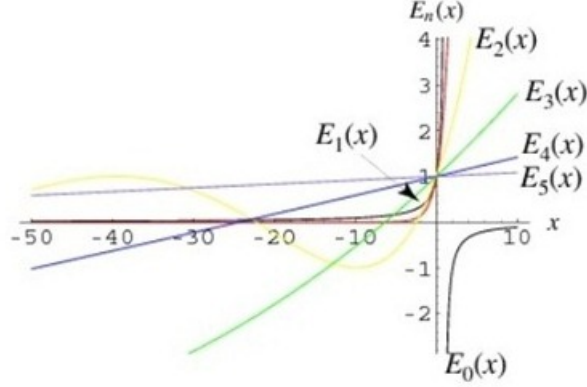
e^z üstel fonksiyonu, tamsayı mertebeli diferansiyel denklemlerde çok önemli bir role sahiptir. Bu üstel fonksiyonun bir genelleştirmesini, 1903 yılında İsveçli matematikçi Mittag-Leffler yapmış ve kendi adıyla bilinen fonksiyonu tanımlamıştır. Ancak bu fonksiyonun üzerinde birçok bilim insanı çalışmış ve kullanılacak alana göre birçok farklı tipi geliştirilmiştir. Fizik, biyoloji, mühendislik, yerbilimleri gibi birçok alandaki problemlerin çözümünde, çok geniş bir potansiyeli olduğundan son yirmi yıl içinde çok daha fazla kullanılır olmuştur [53].

Bir Parametrelili Mittag-Leffler Fonksiyonu

Fonksiyonun 1093te Mittag-Leffler tarafından tanımlanan ilk hali bir parametrelidir. C kompleks sayılar kümesi ve $\alpha \in C$ olmak üzere, $E(\cdot)$ notasyonu ile gösterilen bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonu

$$E_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(1 + \alpha k)}, \quad R(\alpha) > 0, \quad z \in C \quad (3.14)$$

şeklinde tanımlanır. Farklı değerler için bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonlarına ait eğriler Şekil 3.2 de görülmektedir. Bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonu, kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin çözümlerinde sıklıkla kullanılır.



Şekil 3.2: Farklı değerler için bir parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonları

İki Parametrelili Mittag-Leffler Fonksiyonu

İki parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonu, 1953 yılında Wiman tarafından eşitlik (3.15) de görüldüğü şekliyle ilk kez tanımlanmıştır. Daha sonra üzerinde yine Wiman ile Agarwal ve Humbert tarafından da çalışılmıştır.

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\beta + \alpha k)}, \quad R(\alpha) > 0, \quad R(\beta) > 0, \quad z, \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (3.15)$$

İki parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonlarında, α ve β parametrelerinin özel değerlerde seçilmesiyle $E_{\alpha,\beta}$ fonksiyonu, bilinen bazı fonksiyonlara dönüşmektedir. Bunlardan bazıları aşağıda gösterilmiştir. Örneğin:

$\alpha = 1$, $\beta = 1$ seçildiğinde;

$$E_{1,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} = e^z \quad (3.16)$$

$\alpha = 1$, $\beta = 2$ seçildiğinde;

$$E_{1,2}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+2)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{(k+1)!} = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{(k+1)!} = \frac{e^z - 1}{z} \quad (3.17)$$

$\alpha = 1$, $\beta = 3$ seçildiğinde;

$$E_{1,3}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+3)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{(k+2)!} = \frac{1}{z^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+2}}{(k+2)!} = \frac{e^z - 1 - z}{z^2} \quad (3.18)$$

Genelleştirilirse;

$$E_{1,m}(z) = \frac{1}{z^{m-1}} \left\{ e^z - \sum_{k=0}^{m-2} \frac{z^k}{k!} \right\} \quad (3.19)$$

Hiperbolik sinüs ve kosinüs fonksiyonları da Mittag-Leffler fonksiyonunun özel durumlarıdır. Örneğin:

$$E_{2,1}(z^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{\Gamma(2k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{(2k)!} = \cosh(z) \quad (3.20)$$

$$E_{2,2}(z^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{\Gamma(2k+2)} = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k+1}}{(2k+1)!} = \frac{\sinh(z)}{z} \quad (3.21)$$

Özel parametre değerleri ile n . mertebeden hiperbolik, trigonometrik fonksiyonların genelleştirilmiş hallerine ulaşmak mümkündür[98]. Ancak $\beta = 1$ seçildiğinde, eşitlik (3.15) in iki parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonunun bir parametreliliye dönüştüğü görülmektedir.

$$E_{\alpha,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \equiv E_{\alpha}(z) \quad (3.22)$$

3.1.4 Wright Fonksiyonu

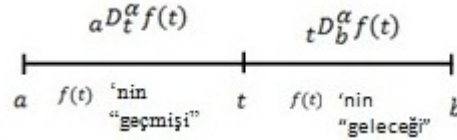
Wright fonksiyonu, kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin çözümlerinde önemli rol oynar, örneğin; kısmi türevli dalga yayılma denklemi. Bu fonksiyon, $E_{\alpha,\beta}(z)$ iki parametrelili Mittag-Leffler fonksiyonu ile ilişkilendirilmek suretiyle Wright tarafından tanımlanmıştır. Daha sonra Humbert ve Agarwal, Laplace dönüşümlerini kullanarak bu fonksiyonla ilgili çok kullanışlı özellikler, ilişkiler geliştirmiştir. Wright fonksiyonu eşitlik (3.23) daki gibi tanımlanır.

$$W(z; \alpha, \beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k! \Gamma(\alpha k + \beta)} \equiv E_{\alpha}(z) \quad (3.23)$$

3.2 KESİRLİ TÜREV TANIMLARI

Kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerde bazen bulunması gereken katsayılar basit formda olmadıklarından bu denklemlerin analitik çözümleri kolay değildir. Bu sebeple, probleme uygun sayısal yöntemlerin farklı metotları kullanılarak yaklaşık çözümler yapılır. Bu metotları uygularken, kesirli mertebeden türev, ayrıca çözülmesi gereken bir problem oluşturur. Kesirli türevler yerine kullanılacak bazı fonksiyonlar geliştirilmiştir. Aşağıda bu fonksiyonlar ele alınmaktadır.

Kesirli türevler tiplerinin tanımlarını vermeden önce, sol ve sağ türev kavramını burada açıklamak yerinde olacaktır. ${}_aD_t^\alpha$ ifadesi, $a < t$ kabulü ile sabit alt sınır a ile hareketli üst sınır t arasındaki kesirli türevi ifade eder. Ancak kesirli türevleri, hareketli alt sınır t ile sabit üst sınır b arasında düşünmek mümkündür. $f(t)$, a ve b nin sonsuz olabilme koşulu altında, $[a, b]$ aralığında tanımlı olsun. Alt sınırı $[a, b]$ aralığının sol ucunda olan kesirli türev, ${}_aD_t^\alpha$, *sol kesirli türev* denir. Üst sınırı $[a, b]$ aralığının sağ ucunda olan kesirli türev, ${}_tD_b^\alpha$, *sağ kesirli türev* denir. Fiziksel problemlerde, $f(t)$ zaman değişkenli bir süreç fonksiyonunu temsil ediyorsa, sağ türev $f(t)$ sürecinin gelecekteki durumunu ifade eder. Şekil 3.3. Ancak $f(t)$ sürecinin şimdiki durumu gelecekteki durumuna bağlı değildir. Fiziksel bir problem tanımlanırken, sağ türev doğal olarak ortaya çıksa da bu sebeple genellikle ihmal edilir.



Şekil 3.3: Fonksiyonun 'geçmiş' ve 'gelecek' durumunu temsil eden sol ve sağ kesirli türevler

Sol ve sağ kesirli türev olguları, farklı koşullar altında, Riemann Liouville, Grünwald-Letnikov, Caputo ve diğerleri gibi kesirli türev çeşitlerini oluşturur [98].

3.2.1 Grünwald - Letnikow Kesirli Türevi

Grünwald-Letnikow kesirli türevi, kesirli mertebeden geriye farka ait bir limit olarak tanımlanmıştır. Bu tanım yapılırken türevin genel tanımından yola çıkılmış ve gamma fonksiyonlarından yararlanılmıştır. $f, [a, b] \in R$ üzerinde integrallenebilen bir fonksiyon ve $\alpha > 0$ olmak üzere α . mertebeden *sol ve sağ Grünwald-Letnikow kesirli türevleri* sırasıyla

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \lim_{nh=t-a, h \rightarrow 0} h^{-\alpha} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{\alpha}{r} f(t - rh) \quad (3.24)$$

$${}_t D_b^\alpha f(t) = \lim_{nh=b-t, h \rightarrow 0} h^{-\alpha} \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{\alpha}{r} f(t + rh) \quad (3.25)$$

Yine yukarıdaki sebepler çerçevesinde sol türev dikkate alınarak $m, m > p - 1$ koşulunu sağlayan bir tamsayı olmak şartıyla, $f^{(k)}(t)$, ($k = 1, 2, \dots, m + 1$) türevlerinin $[a - t]$ kapalı aralığında sürekli olduğu varsayılırsa, eşitlik (3.26) ile verilen Grünwald-Letnikow kesirli türev tanımı elde edilir. Burada m 'nin mümkün olan en küçük değeri, $m < p < m + 1$ eşitsizliği ile elde edilmektedir [98, 68, 31, 88].

$$\begin{aligned} {}_a D_t^\alpha f(t) &= \lim_{h \rightarrow \infty} f_h^{(p)}(t) \\ {}_a D_t^\alpha f(t) &= \sum_{k=0}^m \frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{-\alpha+k}}{\Gamma(-\alpha+k+1)} + \frac{1}{\Gamma(-\alpha+k+1)} \int_a^t (t-\tau)^{m-\alpha} f^{m+1}(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.26)$$

Grünwald-Letnikow kesirli türevi, integralli bir terim içerdiğinden kullanışlı gibi görünmesine rağmen, aynı zamanda integralsiz bir terim de içerdiğinden, bazı durumlarda kullanışsız olabilmektedir.

3.2.2 Riemann - Liouville Kesirli Türevi

Riemann-Liouville kesirli türev tanımı oldukça yaygın kullanılmaktadır. $f, [a, b]$ üzerinde integrallenebilen, zaman değişkenli bir fonksiyon ve $n - 1 \leq \alpha \leq n$, $n \in N^+$ olmak üzere α . mertebeden *sol ve sağ Riemann-Liouville kesirli türevleri* sırasıyla

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dt}\right)^n \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \quad (3.27)$$

$${}_t D_b^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(-\frac{d}{dt}\right)^n \int_t^b (\tau-t)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \quad (3.28)$$

biçiminde tanımlanır [98]. α nın tamsayı olması durumunda, sol ve sağ Riemann-Liouville kesirli türevleri aşağıdaki gibi tamsayı mertebeli türevlere dönüşür.

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \left(\frac{d}{dt}\right)^\alpha \quad \text{ve} \quad {}_t D_b^\alpha f(t) = \left(-\frac{d}{dt}\right)^\alpha$$

Ancak bugüne kadar yapılmış, fiziksel problemlerin ele alındığı çalışmalarda, problem tanımlanırken, sürecin şimdiki durumunun gelecekteki durumuna bağlı olmayışı sebebiyle, sağ türev doğal olarak ortaya çıktığı halde genellikle ihmal edilmiş ve Riemann-Liouville kesirli türevi ile eşitlik (3.27) ile verilen sol türev kastedilmiştir [98, 68, 31, 88]. $t \geq 0$ için n sürekli türevi olan $f(t)$ fonksiyonlarının bir sınıfı ele alındığında, eşitlik (3.24) ile verilen Grünwald-Letnikov kesirli türevi, eşitlik (3.27) ile verilen Riemann-Liouville kesirli türevine denktir. $n = 1$ ve $0 < \alpha < 1$ olması durumunda Riemann-Liouville kesirli türevi aşağıdaki gibi olur.

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_a^t \frac{f(\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha} \quad (3.29)$$

3.2.3 Caputo Kesirli Türevi

Eşitlik (3.32) ile verilen Riemann-Liouville kesirli türev tanımı, teorik matematik alanındaki kesirli türev ve integral ve onların uygulamaları ile ilgili teorilerin geliştirilmesinde önemli roller oynadı. Ancak teknolojinin gelişmesiyle sadece saf matematik alanında değil, özellikle viskoelastisite ve katı mekaniği gibi birçok alanda maddesel özellikleri daha iyi tanımlayan, zenginleştirilmiş reolojik modelleri taban alan matematiksel modellemelerde, kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerle beraber problemin başlangıç koşullarını da ifade eden formülasyonların oluşturulması önem kazandı. Uygulamalı problemlerde, $f(a), f(a)', f(a)'', \dots$

gibi fonksiyonun kendisi ve farklı mertebelerden türevlerini içeren ve fiziksel olarak yorumlanabilen başlangıç koşullarının kullanımına imkan sağlayan kesirli türev tanımları gerektirmektedir.

Ancak ne yazık ki, Riemann-Liouville yaklaşımı; bir problemde, aşağıda görüldüğü gibi, $k = 1, 2, \dots, n$ ve b_k verilen katsayılar olmak üzere, $t = a$ alt sınırındaki Riemann-Liouville kesirli türevlerinin limit değerlerini içeren başlangıç koşullarını kullanmayı gerektirir.

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\alpha-1} f(t) &= b_1 \\
\lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\alpha-2} f(t) &= b_2 \\
&\vdots \\
\lim_{t \rightarrow a} {}_a D_t^{\alpha-n} f(t) &= b_n
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Bu tür başlangıç koşulları içeren başlangıç değer problemleri matematiksel olarak başarılı bir şekilde çözülebilsede fiziksel olarak yorumlanmaları mümkün olmadığından, bu çözümler pratikte kullanışsızdır. Bu duruma örnek çözümler [106] daki kitapta görülebilir. Kesirli diferansiyel tekniklerle yapılan matematiksel hesaplamalarda, başlangıç koşullarını fiziksel durumlara en uygun şekilde veren Caputo kesirli türev tanımları olmuştur. Bu açıdan, Riemann-Liouville ve Caputo tanımları arasındaki farklara örnek olarak şu örnek verilebilir: Caputo kesirli türev tanımlarına göre sabitin türevi 0 dır, ancak a alt limitinin sonlu değere sahip olması durumunda C sabitinin Riemann-Liouville kesirli türevinin değeri 0 a eşit değil,

$${}_0 D_t^\alpha C = \frac{C t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \tag{3.31}$$

eşitliği ile hesaplanan değere eşittir. Matematiksel teoriler ve uygulamalı teorilerin gerektirdiği özel durumlar arasındaki bu türden çelişkilere çözüm, ilk olarak Caputo tarafından yazılan [18, 19] deki makaleler ile ortaya kondu ve daha sonra da yine Caputonun [20] ile verilen kitabında bu çözümlere yer verildi. İlerleyen yıllarda (1988-1995), El-Sayed de bu konuda çalışmış ve bu duruma ait çözümler ortaya koymuştur [40, 36, 37, 38, 39, 41]. Caputo kesirli türev tanımı eşitlik (3.32)

ile verilmektedir.

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha - n)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t - \tau)^{\alpha+1-n}} d\tau, \quad n - 1 < \alpha < n \quad (3.32)$$

Caputo kesirli türevinin, $0 < \alpha < 1$ olması durumunda aldığı hal aşağıda verilmiştir.

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha - n)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t - \tau)^\alpha} d\tau, \quad (x > a) \quad (3.33)$$

$\alpha = n \in N$ olma durumunda Caputo kesirli türevi

$$D_a^n f(t) = f^{(n)}(x) \quad (3.34)$$

halini alır ve aynı koşul altında $n = 0$ değeri için fonksiyonun Caputo kesirli türevi

$$D_a^0 f(t) = f(x) \quad (3.35)$$

şeklinde tanımlanır. $f(x)$ fonksiyonunun kesirli türevi $\alpha \rightarrow n$ için $f(x)$ in n . tam sayılı mertebeden türevi haline gelir.

Kısaca özetlemek gerekirse, Caputo yaklaşımının en temel avantajı, Caputo kesirli türevlerine ait başlangıç koşullarının, tam sayılı mertebeden diferansiyel denklemlerin başlangıç koşulları cinsinden ifade edilmesidir. Bu avantaj farklı bir şekilde şöyle ifade edilebilir: Caputo türevleri, $t = a$ alt limitinde bilinmeyen ve bulunmak istenen fonksiyonların tam sayılı mertebeden türevlerinin limit değerlerini içerir [98]. Sıfır başlangıç koşulları için Riemann-Liouville, Grünwald-Letnikov ve Caputo kesirli türev tanımları çakışır. Bu yüzden, kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerle ifade edilen başlangıç değer problemlerinin sayısal çözümleri, çözümde seçilip kullanılan kesirli türev tanımından bağımsızdır. Bu sebeple bir çok araştırmacı bu tür problemlerde Caputo türev tanımlarını kullanır. Riemann-Liouville türev tanımı seçilirse ya kesirli türevli başlangıç koşullarından kaçınılır ya da sadece sıfır başlangıç koşullu durumlar üzerinde çalışılır [101].

Bu çalışmada da ele alınan zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denkleminde Caputo kesirli türev tanımı kullanılmıştır.

3.2.4 Erdelyi-Kober Kesirli Türevi

$f(x)$, sonlu (a, b) aralığında tanımlı, sürekli, integrallenebilir ve n kez diferansiyellenebilir bir fonksiyon, $\alpha, \eta, \sigma \in R$ ve $\alpha, \sigma > 0$ olmak koşuluyla α mertebesinde Erdelyi-Kober sol ve sağ taraflı kesirli integralleri sırasıyla eşitlik (3.36) ve (3.37) de görülmektedir.

$$I_{a+; \sigma, \eta}^{\alpha} f(x) = \frac{\sigma x^{-\sigma(\alpha+\eta)}}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{t^{\sigma\eta+\sigma-1} f(t) dt}{(x^{\sigma} - t^{\sigma})^{1-\alpha}} \quad (0 \leq a < x < b \leq \infty) \quad (3.36)$$

$$I_{b-; \sigma, \eta}^{\alpha} f(x) = \frac{\sigma x^{\sigma\eta}}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{t^{\sigma(1-\alpha-\eta)} f(t) dt}{(t^{\sigma} - x^{\sigma})^{1-\alpha}} \quad (0 \leq a < x < b \leq \infty) \quad (3.37)$$

Erdelyi-Kober sol ve sağ taraflı kesirli integrallere tekabül eden $f(x)$ fonksiyonuna ait $(0 \leq a < x < b \leq \infty)$ aralığında, $n = [\alpha] + 1$ olmak üzere, Erdelyi-Kober kesirli türev tanımları da eşitlik (3.38) ve (3.39) da görülmektedir [68, 106].

$$D_{a+; \sigma, \eta}^{\alpha} f(x) = \sigma x^{-\sigma\eta} \left(\frac{1}{\sigma x^{\sigma-1}} D \right)^n x^{\sigma(n+\eta)} I_{a+; \sigma, \eta+\alpha}^{n-\alpha} f(x) \quad (3.38)$$

$$D_{b-; \sigma, \eta}^{\alpha} f(x) = x^{\sigma(\eta+\alpha)} \left(-\frac{1}{\sigma x^{\sigma-1}} D \right)^n x^{\sigma(n-\eta-\alpha)} I_{b-; \sigma, \eta+\alpha-n}^{n-\alpha} f(x) \quad (3.39)$$

3.2.5 Hadamard Kesirli Türevi

$f(x)$, sonlu (a, b) aralığında sürekli, integrallenebilir ve n kez diferansiyellenebilir bir fonksiyon olmak ve $\alpha \in R$ koşuluyla, $f(x)$ fonksiyonunun α mertebesinde *sol ve sağ taraflı* Hadamard kesirli türevleri eşitlik (3.40) ve (3.41) de görülmektedir [68, 106].

$${}_x D_{a+}^{\alpha} f(t) = \left(x \frac{d}{dx} \right)^n \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x \left(\log \frac{x}{t} \right)^{n-\alpha-1} \frac{f(t)}{t} dt, \quad (a < x < b) \quad (3.40)$$

$${}_x D_{b-}^{\alpha} f(t) = \left(-x \frac{d}{dx} \right)^n \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_b^x \left(\log \frac{t}{x} \right)^{n-\alpha-1} \frac{f(t)}{t} dt, \quad (a < x < b) \quad (3.41)$$

3.3 KESİRLİ TÜREVLERİN BAZI ÖZELLİKLERİ

3.3.1 Lineerlik

Tamsayılı mertebeden türevler gibi kesirli mertebeden türevler de lineerlik özelliği gösterirler. D^p , kesirli diferansiyellenmenin değişim veya dönüşüm geçirmiş herhangi bir hali ise, lineerlik özelliği aşağıdaki gibi verilir [14, 88].

$$D^p (\lambda f(t) + \mu g(t)) = \lambda D^p f(t) + \mu D^p g(t) \quad (3.42)$$

3.3.2 Homojenlik

Tamsayılı mertebeden türevler gibi kesirli mertebeden türevler de homojenlik özelliği gösterirler. C herhangi bir sabit olmak üzere, homojenlik özelliği aşağıdaki gibi verilir [14, 88].

$${}_0D_t^\alpha [Cf(t)] = C [{}_0D_t^\alpha f(t)] \quad (3.43)$$

3.3.3 Birleşme Özelliği

Diferintegral, kombine bir diferansiyasyon/integrasyon işlemcidir. Belirli koşullar sağlandığında diferintegrallerle

$$\begin{aligned} D^\alpha D^\beta &= D^\beta D^\alpha \\ D^\alpha D^\beta &= D^{\alpha+\beta} \\ D^\alpha f = g &\rightarrow D^{-\alpha} g \end{aligned}$$

gibi işlemler yapılabilir. Bir $f(t)$ sürekli fonksiyonu için α ve β pozitif sayılar olmak üzere, $\alpha < \beta$, yani $\alpha - \beta < 0$ koşulu altında eşitlik (3.44) geçerli olur.

$${}_aD_t^\alpha [{}_aD_t^{-\beta} f(t)] = {}_aD_t^{\alpha-\beta} f(t) \quad (3.44)$$

Ancak önce türevin, sonra integralin alındığı durumlarda diferintegraller eşitlik (3.45) ile hesaplanır [14, 88].

$${}_aD_t^{-\beta} [{}_aD_t^\alpha f(t)] = {}_aD_t^{\alpha-\beta} f(t) - \sum_{k=\beta-\alpha}^{\beta-1} \frac{(t-k)^k}{k!} f^{(\alpha+k-\beta)}(a) \quad (3.45)$$

3.3.4 Kesirli Türevler için Leibniz Kuralı

İki fonksiyonun çarpımının türev değerini bulmak için kolaylık sağlayan Leibniz kuralı, özellikle kesirli türevi bilinen bir fonksiyon ile bir polinomun çarpımının kesirli türevini hesaplamak için çok kullanışlıdır. Eğer $f(t)$ ve $g(t)$ fonksiyonlarının türevleri $[a, t]$ aralığında süreklirse Leibniz kuralı eşitlik (3.46) ile ifade edilir[98].

$${}_aD_t^\alpha (g(t)f(t)) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} g^{(k)}(t) {}_aD_t^{\alpha-k} f(t) \quad (3.46)$$

3.3.5 Bileşik (Composite) Fonksiyonların Kesirli Türevleri

Birleşik fonksiyonların kesirli mertebeden türevleri için kullanılan bağıntı, çarpım halindeki fonksiyonların kesirli mertebeden türevlerini almak için geliştirilmiş olan Leibniz kuralının bir sonucu olarak elde edilir. $g(t)$ fonksiyonu

$$g(t) = F(h(t)) \quad (3.47)$$

şeklinde, diferansiyellenebilir $h(t)$ fonksiyonu cinsinden verilen bir bileşik fonksiyon ise, $g(t)$ fonksiyonunun α kesirli mertebesinden türevi, eşitlik (3.51) de verilen ve Bruno zincir kuralı olarak adlandırılan ifade yardımıyla hesaplanır.

$$\begin{aligned} {}_aD_t^\alpha F(h(t)) &= \frac{(t-a)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} g(t) + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \binom{\alpha}{k} \frac{k!(t-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} \sum_{m=1}^k F^{(m)}(h(t)) \sum_{r=1}^k \frac{1}{a_r!} \left(\frac{h^{(r)}(t)}{r!} \right)^{a_r} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Burada toplam \sum

$$\sum_{r=1}^k = r a_r = k \quad ve \quad \sum_{r=1}^k = a_r = m \quad (3.49)$$

olmak üzere a_1, a_2, \dots, a_k nın pozitif tamsayı değerleri üzerinden alınır.

3.4 KESİRLİ DİFERANSİYEL HESABINDA KULLANILAN BAZI DÖNÜŞÜMLER

3.4.1 Laplace Dönüşümü ile İlgili Temel Bilgi

Laplace dönüşümü ile ilgili bazı temel bilgilerin burada verilmesi yararlı olacaktır. Laplace dönüşümü ile ifade edilen fonksiyonlar büyük harf, orijinal fonksiyonlar da küçük harfle gösterilirse, s kompleks değişkenli $F(s)$ fonksiyonu, başlangıçta ele alınan $f(t)$ fonksiyonunun Laplace dönüşümü olarak aşağıdaki şekilde verilir.

$$F(s) = L\{f(t); s\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (3.50)$$

Eşitlik (3.50) deki integralin var olabilmesi için $f(t)$ fonksiyonunun p mertebesinden üstel bir fonksiyon olması gerekir. Bu da bütün $t > T$ değerleri için

$$e^{-pt} |f(t)| \leq M$$

olacak şekilde M pozitif sabitlerin bulunması anlamına gelir. Diğer bir deyişle $f(t)$ fonksiyonu, $t \rightarrow \infty$ iken belirli bir üstel fonksiyondan daha hızlı artmamalıdır.

Orijinal $f(t)$ fonksiyonu, $F(s)$ Laplace dönüşümü yardımıyla ters Laplace dönüşümü kullanılarak elde edilir.

$$f(t) = L^{-1}\{F(s); s\} = \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{-st} F(s) ds \quad c = \text{Re}(s) > c_0 \quad (3.51)$$

c_0 , eşitlik (3.50) deki Laplace integralinin mutlak yakınsama düzleminin sağ yarısında yer almaktadır. Eşitlik (3.51) te verilen ters Laplace dönüşümünün kullanımı genellikle çok karmaşıktır ancak bazen bilinmeyen orijinal $f(t)$ fonksiyonunun davranışları ile ilgili kullanışlı bilgiler sağlar [98].

3.4.2 Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov Kesirli Türevlerinin Laplace Dönüşümü

Riemann-Liouville ve Grünwald-Letnikov kesirli integrallerinin Laplace dönüşümü, $\alpha > 0$ olmak üzere eşitlik (3.52) deki gibi verilir.

$$L \{ {}_0D_t^{-\alpha} f(t); s \} = s^{-\alpha} F(s) \quad (3.52)$$

Riemann-Liouville kesirli türevlerinin Laplace dönüşümü de yine $\alpha > 0$ olmak üzere

$$L \{ {}_0D_t^\alpha f(t); s \} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k [{}_0D_t^{\alpha-k-1} f(t)]_{t=0} \quad (n-1 \leq \alpha \leq n) \quad (3.53)$$

şeklinde verilir. Ancak bu tanım, $t = 0$ alt limitinde kesirli türevlerin limit değerlerinin fiziksel gösterimleri mümkün olmadığından, matematiksel olarak çözümlerde kullanılsa da fiziksel problemlere uygulanabilirliği sınırlıdır.

Grünwald-Letnikov kesirli türevinin Laplace dönüşümü de $0 < \alpha < 1$ olmak üzere eşitlik (3.54) deki gibi tanımlanır [98].

$$L \{ {}_0D_t^\alpha f(t); s \} = s^\alpha F(s) \quad (3.54)$$

3.4.3 Caputo Türevinin Laplace Dönüşümü

Caputo kesirli türevinin Laplace dönüşümü eşitlik (3.55) deki gibi verilir.

$$L \{ {}_0D_t^\alpha f(t); s \} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0) \quad (n-1 \leq \alpha \leq n) \quad (3.55)$$

Görüldüğü gibi Caputo türevinin Laplace dönüşüm denklemi, ele alınan problemle ilgili fiziksel yorumların kesin olarak yapılabildiği $t = 0$ alt sınırında, $f(t)$ ve türevlerinin değerlerini içermektedir. Örneğin, $f(0)$ bir cismin başlangıç konumunu tanımlıyorsa, $f(0)'$ başlangıç hızını, $f(0)''$ başlangıç ivmesini tanımlar. Geleneksel formdaki, başlangıç koşullarını belirleyen sabit katsayılar içeren, lineer kesirli mertebeden diferansiyel denklemler ile ifade edilen uygulamalı problemlerin çözümünde Caputo kesirli türevinin Laplace dönüşümü kullanışlıdır [98].

3.4.4 Fourier Dönüşümü ile İlgili Temel Bilgi

Fourier dönüşümü, $(-\infty, \infty)$ aralığında integrallenebilen sürekli bir $h(t)$ fonksiyonu için

$$F_e \{ h(t); w \} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iwt} h(t) dt \quad (3.56)$$

şeklinde verilir. Bilinen Fourier dönüşümünden orijinal $h(t)$ fonksiyonunun eldesini sağlayan ters Fourier dönüşümü de eşitlik (3.57) de görülmektedir.

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_e e^{-iwt} dw \quad (3.57)$$

3.4.5 Kesirli Türevlerin Fourier Dönüşümü

Kesirli türevlerin Fourier dönüşümlerinden önce kesirli integrallerin Fourier dönüşümlerine değinmek yararlı olacaktır. Riemann-Liouville kesirli integralinin Fourier dönüşümü $0 < \alpha < 1$ olmak üzere

$$F_e \{ {}_{-\infty}D_t^{-\alpha} g(t); w \} = (iw)^{-\alpha} G(w) \quad (3.58)$$

şeklinde verilir. Bu dönüşüm Grünvald-Letnikov kesirli integrali ${}_{-\infty}D_t^{-\alpha} g(t)$ ve Caputo kesirli integrali ${}_{-\infty}^C D_t^{-\alpha} g(t)$ için de geçerlidir.

Eşitlik (3.58) kullanılarak kesirli türevlere ait Fourier dönüşümü bağıntısı elde edilir. $g(t)$ fonksiyonunun $a = -\infty$ alt sınırında ve $g(t)$ nin türevinin $t \rightarrow -\infty$ için makul bir davranışı olduğu kabulü altında, kısmi integral alınarak düzenlendiğinde, $n - 1 < \alpha < n$ koşuluyla Riemann-Liouville, Grünvald-Letnikov ve Caputo kesirli türevleri aşağıdaki gibi aynı formda yazılabilir.

$$\left. \begin{array}{l} {}_{-\infty}D_t^{-\alpha} g(t) \\ {}_{-\infty}D_t^{-\alpha} g(t) \\ {}_{-\infty}^C D_t^{-\alpha} g(t) \end{array} \right\} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_{-\infty}^t \frac{g^{(n)}(\tau) d\tau}{(t - \tau)^{\alpha+1-n}} = {}_{-\infty}D_t^{\alpha-n} g^{(n)}(t) \quad (3.59)$$

Eşitlik (3.59) kullanılarak $a = -\alpha$ alt sınırında, Riemann-Liouville, Grünvald-Letnikov ve Caputo kesirli türevleri için eşitlik (3.60) te görülen aynı formdaki Fourier dönüşüm ifadesi elde edilir [98].

$$\begin{aligned} F_e \{ D^\alpha g(t); w \} &= (iw)^{\alpha-n} F_e \{ g^{(n)}(t); w \} \\ &= (iw)^{\alpha-n} (-iw)^n G(w) \\ &= (iw)^\alpha G(w) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Yukardaki eşitlikte $D^\alpha g(t)$ gösterimi; Riemann-Liouville ${}_{-\infty}D_t^\alpha g(t)$, Grünvald-Letnikov ${}_{-\infty}D_t^\alpha g(t)$ ve Caputo ${}_{-\infty}^C D_t^\alpha g(t)$ kesirli türevlerini temsil etmektedir.

BÖLÜM 4

KİSMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİ

4.1 SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Dalga denklemleri, bir parçacığın veya bir alanın dinamik gelişim sürecini tanımlamada önemli bir role sahiptir. Örneğin Maxwell denklemleri, elektromanyetik alanın davranışını kısmi diferansiyel denklem cinsinden tanımlamaktadır. Kuantum mekaniğinde ise bir parçacık; kinetik terimin Laplace operatörüyle verildiği nonrelativistik Schrödinger dalga denklemleri ile tanımlanabilir. Bazı koşullar altında Schrödinger denkleminin relativistik ifadesi de vardır. Schrödinger denklemi; bir kuantum sistemi hakkındaki her türlü bilgiyi veren ve bu sistemi tanımlayan bir dalga fonksiyonudur. Dalga fonksiyonunun uzaya ve zamana bağlı değişimini, ilk kez Avusturyalı fizikçi Erwin Schrödinger gösterdiğinden, bu denklem onun adıyla anılır. 1900 yılında Max Planck'ın "Kuantum Varsayımları" nı ortaya koymasından sonra 1924 te de Broglie varsayımı ve 1927 de "Heisenberg Belirsizlik İlkesi" nin ortaya atılması, bilim dünyasında yeni ufukların doğmasına sebep oldu. Bu gelişmeler sonucunda, Max Planck'ın kuantum varsayımlar ve Schrödinger'in dalga mekaniği birleştirilmesiyle "Kuantum Mekaniği Kuramı" oluştu.

Klasik mekanikte bir parçacığın hareket durumu, parçacığın konumu ve hızıyla verilir. Kuantum mekaniğinde ise bir parçacığın hareket durumu dalga

fonksiyonları ile verilir. Aslında her iki mekanikte de parçacığın durumunun zamana bağlı olarak nasıl değişeceğini öngörmek temel sorunu teşkil eder. Parçacığın durumu her iki mekanikte de hareket denklemleriyle verilir. Klasik mekanikte hareket denklemi, Newtonun ikinci yasasıyla verilen $\vec{F} = m\vec{a}$ dır. $t = 0$ anında parçacığın hız ve konumu biliniyorsa daha sonraki herhangi bir andaki konum ve hız bu yasa ile bulunur. Kuantum mekaniğindeki hareket denklemi ise zamana bağlı veya zamandan bağımsız olarak tanımlanabilen Schrödinger denklemdir. Parçacığın $t = 0$ anındaki dalga fonksiyonu biliniyorsa zamana bağlı Schrödinger denklemi çözülerek herhangi bir andaki dalga fonksiyonları bulunur ve parçacığın kendine özgü özellikleri belirlenir. Madde dalgası olarak da bilinen $\psi(x, y, z)$ Schrödinger dalgasının klasik fizikteki karşılığında farkı bir olasılık dalgası olmasıdır. Bu dalgaları ifade eden fonksiyonlar, parçacığın belirli bir t anındaki x konumunda bulunma olasılığını verir. Kısaca Schrödinger denklemi, bir kuantum sistemi hakkında araç dalga fonksiyonudur.

Schrödinger denkleminin elde edilmesini açıklamaya başlamadan önce, bunu oluşturan temel postülatları (varsayımları) ele almak yararlı olacaktır [16, 92, 111].

4.1.1 Max Planck'ın Kuantum Varsayımları

Max Planck 1900 yılında siyah cisim ışımasını araştırırken, yaptığı deneyle tam uyumlu bir formül önererek iki tane çarpıcı ve tartışmalı varsayım ileri sürdü. Böylece *kuantum* kavramı doğmuş oldu. Bu varsayımlar şöyle özetlenebilir:

- Işınım yayan ve titreşen bir sistemin enerjisi, ν fotonun frekansı, h Planck sabiti olmak üzere;

$$E = nh\nu \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (4.1)$$

ile verilen kesikli enerji değerlerindedir.

- Atomlar *quanta* (foton) denilen ışık enerjisinin kesikli birimleri cinsinden enerji yayınlar veya soğururlar.

$$E = h\nu \quad (4.2)$$

1904 yılında ilk kez A. Einstein tarafından kullanılan ve *ışık enerjisi paketi veya yumağı* anlamına gelen *foton*, en genel anlamda *elektromanyetik dalga paketi* olarak açıklanabilir. Fotonun enerjisi, dalga boyu λ cinsinden ise şöyle tanımlanır:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (4.3)$$

4.1.2 De Broglie Varsayımı

1924 yılında Fransız fizikçi L. de Broglie tarafından ortaya atılan varsayıma göre, momentumu p olan bir parçacığa, dalga boyu

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (4.4)$$

olan bir dalga eşlik eder.

4.1.3 Heisenberg Belirsizlik İlkesi

Farklı frekans, şiddet ve yayılma doğrultusunda olan birden fazla dalganın, uzayın bir noktasında girişimleri sonucunda oluşan enerji paketine *dalga paketi* denir. Dalga paketindeki dalgalar tam olarak üst üste bindiklerinden, bu bölgeler dalgaların grup yaptığı yerlerdir ve dalga paketinin hızına da *grup hızı*, v_g , denir. v_g değeri; gruptaki üst üste binen k dalga sayısına bağlıdır. Dalga paketinin boyutları ya da dalganın eşlik ettiği parçacığın herhangi bir andaki konumu olan x , paketteki k dalga sayısı arttıkça küçülür. Başka bir deyişle, x i doğru belirlemek için dalgaları sıklaştırmak, yani k yı büyütmek gerekir. Dolayısıyla dalga boyu λ olan dalga için k dalga sayısı şöyle verilir:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (4.5)$$

Sonuç olarak; konumun belirlenmesindeki duyarlılık Δx artarken dalga sayısının belirlenmesindeki duyarlılığın, Δk , azaldığı söylenebilir. Yani Δx belirsizliği ile Δk belirsizliği ters orantılıdır.

$$\Delta x = \frac{1}{\Delta k} \quad (4.6)$$

Eşitlik (4.4) ve (4.5) in ortak çözümünden

$$p = \frac{hk}{2\pi} \quad (4.7)$$

elde edilir. Bu ifade kullanılarak, taneciğin momentumunun ölçülmesinde yapılabilecek hata ya da diğer bir deyişle belirsizlik şöyle bulunur:

$$\Delta p \approx \frac{h}{2\pi} \Delta k \quad (4.8)$$

Eşitlik (4.8) de elde edilen sonuç eşitlik (4.6) da yerine yazılırsa;

$$\Delta x \Delta p = \frac{h}{2\pi} = H \quad (4.9)$$

elde edilir, sayısal değeri ise $H = 1,05 \cdot 10^{-34} J \cdot s$ dir. Ölçümler sonucu, her iki büyüklüğe ait belirsizliklerin çarpımı her zaman en az Planck sabiti kadardır.

$$\Delta x \Delta p \geq H \quad (4.10)$$

4.1.4 Olasılık ve Yoğunluk Akısı

Kuantum mekaniği hareketli cisimlerle ilgilenir. De Broglie'ye göre hareketli bir parçacığa eşlik eden dalga $\psi(x, y, z, t)$ ile gösterilir. Ancak bu dalganın boyutu olmadığından fiziksel olarak da bir anlamı yoktur. Parçacığın birim hacimde bulunma olasılığı olan *olasılık yoğunluğu*, $\rho(x, y, z, t)$, bu dalga fonksiyonunun mutlak değerinin karesi olarak yani $|\psi(x, y, z, t)|^2$ olarak verilir.

$$\rho(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 = \psi(x, y, z, t)^* \quad (4.11)$$

Eşitlik (4.11) de verilen tanıma göre, parçacığın herhangi bir $dV = dx dy dz$ hacim elemanı içinde bulunma olasılığı $\rho(x, y, z, t)$ dir. Bu parçacığın tüm uzayda bulunma olasılığı ise parçacık uzayın herhangi bir yerinde mutlak var olacağından, 1'e eşittir.

$$\int_{\text{tüm uzay}} \rho(x, y, z, t) dV = \int_{\text{tüm uzay}} \psi^* \psi dV = 1 \quad (4.12)$$

Eşitlik (4.12), dalga fonksiyonunun *Normalizasyon Koşulu* olarak bilinir.

Olasılık akısı ise $S(x, y, z, t)$ ile gösterilir ve parçacığa ait olasılık yoğunluğunun uzayda yer değiştirmesi olarak tanımlanır. Olasılık akısı ve olasılık yoğunluğu arasında aşağıdaki ilişki mevcuttur.

$$\frac{\partial \rho(x, y, z)}{\partial t} + \nabla S(x, y, z, t) = 0 \quad (4.13)$$

Bu ifadedeki ∇ sembolü, nabla işlemcisi olup

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \quad (4.14)$$

ile verilir. Eşitlik (4.13) ten görüldüğü üzere olasılık akısındaki konuma göre değişim, olasılık yoğunluğunda zamana göre değişime sebep olur [110].

4.1.5 Kuantum Mekanikinin Postülatları

Kuantum mekaniği bir olasılıklar kuramıdır ve sistematüğını anlamak için üzerine kurulduğı birçok postülatı (varsayımı) iyi anlamak gerekir. Bu konuda birçok postülat olmasına rağmen diğerlerinin de dayanağı olan dört ana postülat önemlidir.

Postülat-1: Dalga fonksiyonu ile ilgilidir.

$$r = |r| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (4.15)$$

olmak üzere, her kuantum mekaniksel bir sistemin durumu, $\psi(r, t)$ iyi davranışlı dalga fonksiyonu ile belirlenebilir. Bu dalga fonksiyonun karesi integre edilebilmeli, normalize edilebilmeli, kendisi ve türevi tek değerli, sürekli ve sonlu olmalıdır.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(r, t) \psi(r, t) d\tau = 1 \quad (4.16)$$

Postülat-2: İşlemci (operatör) gözlenebilir büyüklüklerle ilgilidir. Kuantum mekaniğinde ölçülebilen veya gözlemlenebilen her şey *dinamik değişkendir*. Klasik mekanikteki her gözlenebilire, kuantum mekaniğinde bir işlemci karşılık getirilir. İşlemciler $[x, p] = i\hbar$ komitasyon bağıntısını sağlayacak şekilde seçilir. Kuantum mekaniksel işlemciler doğrusal ve hermitik olmalıdır. Schrödinger denkleminde göre dalga fonksiyonunun zamana bağıli değişimini *Hamiltonian* adı verilen bir işlemci kontrol eder. *Enerji operatörü* adıyla da anılan bu işlemci, kuantum sistemin sahip olduğı enerji değerlerini belirler. Fiziksel olarak, Hamiltonian gibi gözlenebilir bir niceliğı temsil eden bir işlemcinin beklenen değeri reel olmalıdır. Beklenen değeri reel olan işlemcilere *hermitik işlemci* denir. Bazı dinamik değişkenler ve onlara ait işlemciler Tablo 4.1 de görölmektedir [15].

	Dinamik Değişken	Koordinat Formunda İşlemcisi
Kinetik enerji	$\frac{p_x^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
Potansiyel Enerji	$V(x)$	$V(x)$
Lineer Momentum	p_x	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
Lineer momentum	p	$-i\hbar\nabla$
Hamiltonian	H	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)$

Tablo 4.1: Bazı dinamik değişkenler ve onlara ait işlemciler

Postülat-3: Tablo 4.1 de örnekleri görüldüğü üzere, her dinamik değişkene lineer ve hermitik bir işlemci, genel ifadesiyle \hat{A} karşılık gelir. Belirlenen işlemciler, dinamik halleri belirleyen dalga fonksiyonuna uygulandığında, *özdeğer denklemi* olarak da bilinen aşağıdaki ifade elde edilir.

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (4.17)$$

Bu ifadede ψ fonksiyonu \hat{A} işlemcisinin *özfonksiyonu*, a ise *özdeğeridir*. Bir işlemcinin özfonksiyonları, o işlemcinin işleyeceği uzayı geren baz vektörleri oluşturur.

Postülat-4: Beklenen değer ile ilgilidir. Belirli bir dinamik haldeki a gibi dinamik bir değişken bir dalga fonksiyonu ile ölçüldüğünde, bu dinamik değişkene karşılık gelen \hat{A} işlemcisinin ortalama değerine eşittir. Aşağıdaki ifade beklenen değeri verir.

$$\langle \hat{A} \rangle = \bar{A} = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} \quad (4.18)$$

4.1.6 Zaman Bağımlı Schrödinger Denklemi

Kuantum mekaniğinin temel problemi, belirli bir $V(r)$ potansiyeli için Schrödinger denklemini çözerek E enerji özdeğerlerini ve $\psi(r)$ özfonksiyonlarını elde etmektir. Bu durumda, önce Schrödinger denkleminin elde edilmesini incelemek yerinde olacaktır.

Klasik mekanikteki kinetik ve potansiyel enerjilerin toplamı olan mekanik enerjiyi, bunların klasik mekanikteki işlemci karşılıkları ile birleştirerek Schrödin-

ger dalga denklemi elde edilir.

Schrödinger'in zamana bağlı denkleminin doğuşu da şöyle açıklanabilir: Klasik fiziğe göre m kütleli bir parçacık uzayın x, y, z boyutlarında bulunmasından dolayı $V(x, y, z)$ potansiyel enerjiye ve $p^2/2m$ şeklinde ifade edilen kinetik enerjiye sahipse, parçacığın tüm enerjisi; $E_{toplam} = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z)$ olur. Schrödinger bu eşitlikten yararlandı ve parçacık ya da parçacıklar sisteminin, farklı yerlerde ne olasılıkla bulunduğunu gösteren zaman-bağımlı $\psi(x, y, z)$ dalga fonksiyonunu oluşturdu. Eşitlik (4.15) dikkate alınarak yazıldığında, Klasik fizikteki toplam enerji, üç boyutlu uzayda zamana bağımlı olarak aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(r, t) = \frac{p^2}{2m} + V(r, t) \quad (4.19)$$

Kuantum mekaniğinde toplam enerji işlemcisi olarak kullanılan ifade ise Tablo 4.1 den de görüleceği gibi, zamandan bağımsız olarak

$$E \rightarrow \hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r) \quad (4.20)$$

zamana bağımlı olarak

$$E \rightarrow \hat{E} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (4.21)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\vec{\nabla}$, eşitlik (4.14) de verildiği gibi kullanılır. Eşitlik (4.20) ve (4.21) ile verilen işlemciler, kütlesi m , potansiyeli V olan hareketli bir parçacığa eşlik eden $\psi(r, t)$ dalga fonksiyonuna uygulanırsa, Schrödinger denklemi en kapalı formda şöyle yazılır:

$$\hat{H}\psi(r, t) = \hat{E}\psi(r, t) \quad (4.22)$$

İşlemciler de açık bir şekilde gösterilirse, \hbar Planck sabitinin değeri $10, 1.10^{-34} J.s$ olmak üzere, zamana bağımlı Schrödinger denkleminin iki farklı gösterimi aşağıdaki gibidir.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(r, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r, t) \quad (4.23)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi(r, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r, t) \quad (4.24)$$

Sonsuz bir potansiyel kuyu içindeki sabit E enerjili bir parçacığa eşlik edip onun davranış olasılıklarını veren dalga fonksiyonu, eşitlik (4.25) de verilen dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak yazılabilir.

$$\psi(r, t) = Ae^{-i(kr - \omega t)} \quad (4.25)$$

$V(r) = 0$ olan serbest parçacık için momentum $p = \hbar k$ ve enerji $E = \hbar \omega$ şeklinde alınarak düzenlemeler yapılırsa, eşitlik (4.25) de gösterilen serbest parçacığa ait harmonik dalga fonksiyonu, p ve E cinsinden şöyle yazılabilir [107]:

$$\psi(r, t) = Ae^{-i(pr - Et)/\hbar} \quad (4.26)$$

Genel olarak zaman bağımlı Schrödinger denklemi, klasik fizikte Newton'un $F = ma$ denklemi ile bir parçacığın dinamiğini tanımladığı gibi, bir parçacığın dinamik davranışını tanımlar. Ancak arada önemli bir fark vardır. Newton denklemi çözüldüğünde, zamanın bir fonksiyonu olarak parçacığın konumu belirlenir. Oysa Schrödinger denkleminin çözümü ile elde edilen $\psi(r, t)$ fonksiyonu, karesi alındığında, parçacığın herhangi bir bölgede bulunma *olasılığının* zamana bağımlı olarak değişimini verir.

4.1.7 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

"E enerjisi ile verilen bir parçacık için dalga fonksiyonu nedir?" sorusunu cevaplamak için, zaman-bağımlı Schrödinger denkleminde zaman bağımlılığı kısmını çıkarmak gerekir. Eşitlik (4.24) te verilen zaman-bağımlı Schrödinger denkleminin sağ tarafı 0 (sıfır) olacak şekilde düzenlenirse aşağıdaki zamandan bağımsız Schrödinger denklemi elde edilir.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \psi(\vec{r}) + (E - V(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = 0 \quad (4.27)$$

Genel olarak işlemciler ile ifade edilirse bu denklem şöyle ifade edilebilir:

$$E\psi(\vec{r}) = \hat{H}\psi(\vec{r}) \quad (4.28)$$

Eşitlik (4.25) veya (4.26) ile verilen zamandan bağımsız Schrödinger denkleminde parçacığın enerjisi olan E niceliği, bir serbest parametredir. Diğer bir deyişle, E

nin muhtemel deęerleri için, hiçbir aşamada herhangi bir kısıtlama yoktur. Bu yüzden eęer herhangi bir E deęerine sahip $V(r)$ potansiyeli altında ilerleyen bir parçacıęa ait dalga fonksiyonu belirlenmek istenirse, yapılması gereken sadece, bu E deęerini uygun $V(r)$ deęeri ile beraber denkleme eklemek ve bu duruma tekabül eden denklemi çözmektir.

4.1.8 Relativistik Schrödinger Denklemi

Parçacıęın kinetik enerjisinin, hareket etmiyorken sahip olduęu iç enerjisinden çok çok daha büyük olma durumu da söz konusu olabilir. Bu durumda parçacıęın enerjisi relativistik (görelî) olarak ařaęıdaki gibi ifade edilir.

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0 c^2 \quad (4.29)$$

Eřitlik (4.24), E ifadesi için eřitlik (4.27) kullanılarak düzenlenirse Relativistik Schrödinger denklemi elde edilir ve $D_t = \frac{\partial}{\partial t}$ olmak üzere

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} D_t^2 \right) \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (4.30)$$

řeklinde yazılır.

4.1.9 Parçacıęın İçinde Bulunduęu Potansiyelin Çözümüne Etkisi

Bir parçacıęa ait Schrödinger denkleminin çözümünde, parçacıęın içinde bulunduęu potansiyele ait bilgiler önemli farklar oluřturur. Ve bu farklar kısaca řöyle özetlenebilir:

- **V nin sabit olması durumu:**

V nin sıfır olması durumu, serbest parçacıęın durumudur. Sıfırdan farklı deęere sahip olması durumlarda ise parçacıęın enerjisine göre E nin uygulanan V potansiyelinden büyük ya da küçük olması durumlarına göre farklı çözümler bulunur. E nin V den küçük olması ve belirli bir genişlikten sonra bu potansiyelin kaldırılması durumunda *Tünel etkisi* gözlemlenir. Bu durumda akım yoğunluęu hesaplanarak geçme ve yansıma katsayıları bulunur.

- $V = V(r)$ olması durumu:

Parçacığa uygulanan potansiyelin, parçacığın konumuna bağlı olduğu, örneğin basit harmonik titreştirici veya Coulomb potansiyeli gibi değişken potansiyel olduğu durumlardır. Bir katıdaki atomların titreşimi ve atomdaki çekirdeğe bağlı elektronların hareketi $V = V(r)$ durumuna örnek olarak verilebilir.

4.2 SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN BAZI ÖZELLİKLERİ

- Parçacığın konumu ve momentumu eş zamanlı olarak dalga fonksiyonu $\psi(\vec{r}, t)$ ile kodlanmıştır. Bu özellik $\psi(\vec{r}, t)$ nin karmaşık olması gerçeği ile yakından ilişkilidir. Gerçel dalganın herhangi bir sabit zamanda ($t = 0$) hareket yönünün belirtilmesi imkansızdır. Hareket yönünü belirlemek için zamana göre türevini (momentum yönünü) belirlemek gerekir. Aşağıda sırasıyla sağa hareketli ve sola hareketli dalga fonksiyonları görülmektedir.

$$\psi_{\rightarrow}(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{ikx - i\omega t} \quad (4.31)$$

$$\psi_{\leftarrow}(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-ikx - i\omega t} \quad (4.32)$$

Schrödinger Denklemi, i kompleks sayısını ve kompleks fonksiyon olan $\psi(\vec{r}, t)$ dalga fonksiyonunu içerir ve bu kompleks dalga fonksiyonunun uzayda ve zamanda nasıl ilerlediğini betimler.

- Zamana bağımlı Schrödinger denklemi de Kuantum mekaniğinin postülatlarından biridir.
- Schrödinger denklemi doğrusaldır, yani Schrödinger denkleminin çözümleri ψ_1 ve ψ_2 ise c_1 ve c_2 keyfi kompleks sayılar olmak üzere $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ de çözümdür (dalgalar için üstüste binme ilkesi).

4.3 DALGA FONKSİYONUNUN $\psi(X, T)$ YORUMU

Herhangi bir t anında parçacığın konumu üzerinde bir ölçüm yapıldığında, parçacığın x ve $x + dx$ arasında bulunma olasılığı $|\psi(x, t)|^2$ ile verilir. Schrödinger denklemi, hem $\frac{\partial}{\partial x}$ hem de $\frac{\partial}{\partial t}$ içerdiğinden kısmi diferansiyel denklemdir. $V(x)$ zamandan bağımsız olduğundan, Schrödinger denklemi iki adet adi diferansiyel denkleme ayrıştırılabilir.

$$\psi(x, t) = T(t)\psi(x) \quad (4.33)$$

Bu şekilde düşünülerek Schrödinger denklemi yeniden düzenlenirse eşitlik (4.33) elde edilir.

$$i\hbar\psi(x)\frac{dT}{dt}(t) = T(t) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) \right\} \quad (4.34)$$

$T(t)\psi(x) \neq 0$ olmak üzere her iki tarafı $T(t)\psi(x)$ ile bölersek aşağıdaki durum elde edilir.

$$i\hbar\frac{1}{T} \frac{dT}{dt}(t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) \right\} \frac{1}{\psi(x)} \quad (4.35)$$

Eşitlik (4.34) de her iki taraf farklı değişkenlere bağlıdır. Bu yüzden aslında bunlar sabit olmalıdır ve bu sabit sistemin toplam enerjisi (E) olarak ele alınırsa,

$$i\hbar\frac{dT}{dt}(t) = ET(t) \quad (4.36)$$

elde edilir. Eşitlik (4.36) ya ait çözüm şöyledir:

$$T(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \quad (4.37)$$

Zaman bağımlılığı, E/\hbar açısal hızıyla zamanda evrim yapan bir faz çarpmanıdır. Zamana bağımlı Schrödinger denklemi eşitlik (4.24) ile zamandan bağımsız Schrödinger denklemi ise eşitlik (4.26) ile verilmiştir. Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, dalga fonksiyonuna etki eden işlemci aynı dalga fonksiyonunu E ile çarpılmış olarak oluşturduğundan, bir özdeğer denklemdir. Kuantum mekaniğinde bu Heisenberg matris yazılım şeklidir ve matrisler de özvektörler ve özdeğerleri beraberinde getirir. $\psi_n(x)$, Schrödinger denkleminin zamana bağlı çözümüdür ve E_n özdeğerli bir sistemin öz durumunu göstermektedir. Bir $\psi_n(x)$ öz durumunun zamansal evrimi en basit halde

$$\psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) \quad (4.38)$$

şeklinde verilir. Tüm $\psi_n(x)$ ler ve bunların her birine karşılık gelen E_n özdeğerlerini bulmak, denklemleri çözmek anlamına gelir [120].

4.4 KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİ

Kısmi türevli kesirli mertebeden Schrödinger denklemi ilk kez Nick Laskin tarafından, Feynman Yolu İntegralinin bir genişletilmiş hali olarak 1999'da ileri sürüldü. Laskin, "Kesirli Schrödinger Denklemi" terimini ilk kez [70] de verilen çalışmasında kullandı. Kesirli mertebeden Schrödinger denklemi, en genel olarak, bilinen Schrödinger denkleminde

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \quad \text{ve} \quad \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial^\beta}{\partial x^\beta}$$

değişimleri yapılarak elde edilir. Schrödinger denklemi, $\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}$ içeriyorsa *zaman-kesirli*, $\frac{\partial^\beta}{\partial x^\beta}$ içeriyorsa *uzay-kesirli*, hem $\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha}$ hem de $\frac{\partial^\beta}{\partial x^\beta}$ içeriyorsa *uzay-zaman kesirli* Schrödinger denklemi olarak adlandırılır.

4.4.1 Zaman Bağımlı Kesirli Mertebeden Schrödinger Denklemi

Eşitlik (4.24) te verilen zaman bağımlı Schrödinger denkleminin Nick Laskin tarafından elde edilen kesirli hali; \vec{r} 3-boyutlu konum vektörü, \hbar indirgenmiş Planck sabiti, $\psi(\vec{r}, t)$ bir parçacığın herhangi bir t anında verilen bir \vec{r} konumunda bulunmasının kuantum mekaniksel olasılık fonksiyonu, $V(\vec{r}, t)$ herhangi bir t anında r konumundaki potansiyel enerji ve $\Delta = \partial^2/(\partial \vec{r}^2)$ Laplace operatörü olmak üzere

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = D_\alpha (-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (4.39)$$

şeklinde verilir. Bu ifadedeki D_α ifadesi

$$[D_\alpha] = [Enerji]^{1-\alpha} \cdot [uzunluk]^\alpha \cdot [zaman]^\alpha \quad (4.40)$$

fiziksel boyutu ile verilen ölçek sabitidir. $\alpha = 2$ olduğunda, m parçacığın kütlesi olmak üzere $D_2 = 1/2m$ şeklinde kullanılır. Eşitlik (4.38) deki $(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}$ işlemcisi ise [72] te tanımlandığı şekliyle 3-boyutlu kesirli kuantum Riesz türevidir. $(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}$ işlemcisi $\psi(\vec{r}, t)$ fonksiyonuna aşağıdaki şekilde uygulanır.

$$(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2} \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} |\vec{p}|^\alpha \varphi(\vec{p}, t) \quad (4.41)$$

Burada \vec{r} konum uzayı (gerçek ya da koordinat uzayı) bulunulan uzaydaki tüm konum vektörlerinin kümesidir. Konum vektörü bir noktayı uzayda tanımlar. \vec{p} momentum uzayı veya \vec{k} -uzayı ise serbest ya da bağlı parçacığa ait \vec{k} dalga vektörlerinin kümesidir. "Dalga vektörü" diye adlandırılır, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ şeklinde ifade edilir. Eşitlik (4.41) de görülen konum ve momentum uzaylarındaki dalga fonksiyonları $\psi(\vec{r}, t)$ ve $\varphi(\vec{p}, t)$ nin 3-boyutlu Fourier dönüşümünden elde edilmiş bir ilişkileri mevcuttur.

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \varphi(\vec{p}, t) \quad (4.42)$$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r}, t) \quad (4.43)$$

Zaman bağımlı kesirli mertebeden Schrödinger denkleminin işlemcilerle ifade edilmiş kapalı formu aşağıda görülmektedir.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}_\alpha \psi(\vec{r}, t) \quad (4.44)$$

Eşitlik (4.44) deki \hat{H}_α Hamilton işlemcisidir ve açık ifadesi eşitlik (4.45) ile verilmiştir.

$$\hat{H}_\alpha = D_\alpha (-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2} + V(\vec{r}, t) \quad (4.45)$$

4.4.2 Zaman Bağımsız Kesirli Mertebeden Schrödinger Denklemi

Eşitlik (4.25) ile verilen ve aynı bölümde anlatılan zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin eldesi için gereken özel koşulların varlığında, zamandan bağımsız Hamilton işlemcisi

$$\hat{H}_\alpha = D_\alpha (-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2} + V(\vec{r}) \quad (4.46)$$

şeklini alır. Bu durumda zamandan bağımsız kesirli mertebeden Schrödinger denklemi, işlemcilerle kapalı formda gösterilirse eşitlik (4.47) deki gibi, daha açık haliyle gösterilirse eşitlik (4.46) da görüldüğü gibi olur.

$$E\psi(\vec{r}) = \hat{H}_\alpha\psi(\vec{r}) \quad (4.47)$$

BÖLÜM 5

KISMİ TÜREVLİ KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN MATEMATİKSEL MODELLENMESİ KONUSUNDA YAPILMIŞ ÇALIŞMALAR

Kesirli mertebeden Schrödinger Denklemleri, Kesirli Kuantum Mekanikliği denklemleri arasında önemli bir yer teşkil eder Standart Kuantum Mekanikğinde üç farklı yolla yaklaşım yapılır. Bunlar; Matris Mekanikliği, Schrödinger Denklemi, ve Feynman Yolu (Path) İntegrali yaklaşımlarıdır.

Kesirli Kuantum Mekanikliği ilk olarak 1999da Nick Laskin tarafından Feynman Yolu İntegralinin genişletilmesi sonucunda ortaya kondu [70, 71, 72]. Naber, Schrödinger denklemleri üzerinde çalışmalar yaptı ve Caputo kesirli türev tanımlarını kullanarak birinci mertebeden Schrödinger denklemini zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemi haline getirdi. Bu çalışmada, Mittag-Leffler fonksiyonu için de yeni özdeşlikler geliştirerek tanımladı [95]. Naber bununla da kalmayıp zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denkleminin serbest parçacık ve potansiyel kuyusu için çözümlerini yaptı. Son yıllarda kesirli hesaplama ve kesirli mertebeden diferansiyel denklemler üzerinde birçok araştırmacı çalıştı [3, 1, 10, 9, 8, 91]. Bu çalışmalarla eşzamanlı ve daha sonra olmak üzere kesirli mertebeden kısmi ve adi Schrödinger diferansiyel denklemleri üzerinde de birçok çalışma yapıldı. Burada, kısmi türevli kesirli mertebeden Schrödinger denklemleri ile ilgili son yıllarda öne çıkmış çalışmalardan söz edilecektir.

Gua, X. ve arkadaşları, kesirli mertebeden Schrödinger denklemini serbest parçacık ve sonsuz kare potansiyel kuyusu için çözdü. Problemi, serbest parçacık için Cauchy problemi halinde ele alarak temel çözüme ulaştılar ve potansiyel kuyusundaki parçacığın enerji seviyeleri ve normalize dalga fonksiyonlarını elde ettiler [49]. Odibat, Z. ve arkadaşları lineer ve nonlinear zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemlerine, Genelleştirilmiş Diferansiyel Dönüşüm Metodu (Generalized Differential Transfer Method GDTM) kullanarak çözüm geliştirdi [96]. Guo, B. ve arkadaşları, periyodik sınır koşullu bir problem olarak ifade edilen bir kesirli mertebeden nonlinear Schrödinger denklemine, Galerkin metoduyla geliştirilmiş olan global düzleştirilmiş bir çözümün varlığını ve tekliğini gösterdi [50]. Rido, S. Z. çalışma arkadaşlarıyla, kesirli mertebeden nonlinear Schrödinger denklemlerinde kesirli türevler için Caputo tanımı kullanarak Adomian Ayrıştırma Metodu (Adomian Decomposition Method ADM) uygulamasıyla çözüme ulaştı [103]. Dong, J. ve arkadaşları, Caputo kesirli türevi ve Riesz kesirli operatörü içeren Schrödinger denklemini geliştirdiler. Bu denklemi kullanarak, zaman-bağımsız potansiyel alanda uzay-zaman-kesirli mertebeden kuantum sisteminin zamana bağlı değişimleri üzerinde, zamana göre kesirli türevin mertebesinin $0 - 1$ ve $1 - 2$ aralığındaki değerleri için, Mittag-Leffler fonksiyonlarını da kullanarak çalıştı [33]. [125, 64, 43] te verilen çalışmalarda, kısmi türevli tamsayılı mertebeden Schrödinger denklemleri için Galerkin metodu kullanılarak çözümler geliştirildi. Baleanu, D. ve arkadaşları, kesirli mertebeden nonlinear Schrödinger denklemlerine yaklaşık analitik çözüm elde etmek için Homotopy Perturbasyon Metodu kullandı. Bu çalışmada çözümler, kolaylıkla hesaplanabilir terimleri olan hızlı yakınsak sonsuz seriler şeklinde elde edildi [13]. Saxena, R. K. ve arkadaşları, Schrödinger denkleminin tek boyutta genelleştirilmiş kesirli çözümlerini, Laplace ve Fourier dönüşümleri, Caputo kesirli türev tanımı ve Mittag-Leffler fonksiyonu kullanarak elde etti [109]. Rozmej, P. arkadaşlarıyla yaptığı çalışmada, kesirli kuantum mekaniği hesaplamaları için gerekli temel formülasyonun geliştirildiği ancak bu alanda çözülmüş problemlerin belirli konularda yaygınlaştığını ve farklı alanlarda genişlemenin gerektiğini vurguladı [105]. Hu, J. ve arkadaşları, kesirli nonlinear Schrödinger denklem sistemini, periyodik sınır koşulu altında ele alıp

sisteme ait çözüm için Fourier dönüşümleri yaptıktan sonra Galerkin metodu kullanıldı [60]. Herzallah, M. A. E. ve arkadaşları, kübik nonlinear kısmi türevli kesirli mertebeden Schrödinger denklemine, Caputo kesirli türev tanımı ve ADM kullanılarak yaklaşım yaptı. Bu çalışmada kübik nonlinear Schrödinger denkleminin gerçek çözümü, kullanılan metotla bulunan yaklaşık çözümün özel bir koşulundaki durumu olarak verildi. Bu metodun kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin çözümünde etkili ve güçlü bir metod olduğu sonucuna vardılar [57]. Wei, L. ve arkadaşları, zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemini, sonlu elemanlar metotlarından tam olarak Local Süreksiz Galerkin (Local Discontinuous Galerkin LDG) metodu kullanarak çözdü. Çözümde kısmi türevler, Caputo kesirli türevi olarak tanımlandı ve diskritizasyon şemasını oluştururken zaman eksenini boyunca sonlu farklar metodu, uzaysal (x) eksenini boyunca LDG kullanıldı [123]. Başka bir çalışmada da problem olarak ele aldıkları zaman-kesirli mertebeden Schrödinger çift denklemlerini çözmek için diskritizasyon şemasını oluştururken, yine zaman eksenini boyunca sonlu farklar metodu, uzaysal (x) eksenini boyunca LDG kullanıldı [124]. Martins, J. ve arkadaşları, dağıtılmış mertebeden ve kesirli-zaman türevi içeren Schrödinger denkleminin uzay ve zaman bağımlı çözümlerini elde etti. Ayrıca kesirli türevler için Green fonksiyonlarının kullanıldığı bu çalışmayla uzaysal operatörlerin tamsayı olmayan boyutlara uygulanışı tamamlandı [87]. Wong, J ve ekibi, kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemini bir başlangıç değer problemi olarak ele aldı ve Caputo kesirli türev formülleri, Laplace dönüşümleri ve olasılık yoğunluğu fonksiyonları kullanarak çözüme ulaştı [122]. Khan, N. A. ve arkadaşları, sıfır veya sıfır olmayan tuzak (trapping) potansiyelli durumlarda, zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemlerine Homotopy Analiz Metodu (HAM) ile çözüm geliştirdi [66]. HAM ile nonlinear problem olarak ele alınan zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemleri de başka bir çalışmada çözülmüştür [66]. Hemida, K. M. ise ekibiyle, Caputo kesirli türev tanımlarını ve metod olarak HAM kullanarak, kesirli kübik nonlinear Schrödinger denklemlerin vasıtasıyla bazı nonlinear kesirli mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklemlere yaklaşımlar yaptı ve çözümler inşa etti [54]. Yılmazel, R. ve arkadaşı, parametre bağımlı, Columb potansiyelli, α -boyutlu kesirli uzayda, ikinci dereceden adi diferansiyel denklem olarak tanımlan-

lanmış Schrödinger denkleminde kesirli hesaplama teknikleri ile çözüm geliştirdi [126]. Ashyralyev, A. ekibiyle yaptığı çalışmada, bağımlı katsayılarla sahip çok boyutlu (multidimensional) kesirli mertebeden Schrödinger diferansiyel denklemleri içeren karışık problemler için, birinci ve ikinci mertebeden doğruluğa sahip fark şemaları oluşturdu. Bu çalışmada, bir boyutlu kesirli Schrödinger diferansiyel denklemindeki uzaysal (x) değişken Dirichlet koşulu ile ele alınarak sayısal metotlarla çözüme gidildi [36]. Başka bir çalışmada, zaman-kesirli mertebeden Klein-Gordon Schrödinger denklem çifti Klein-Gordon Schrödinger denklem çiftinin zamana göre türev kısmındaki mertebenin $\alpha \in (1, 2]$, $\beta \in (0, 1]$ kesirli mertebelerle yer değiştirilmesiyle elde edildi ve kesirli türevler için Caputo kesirli türev tanımı kullanıldı. Bir başlangıç değer problemi olarak ele alınan bu çalışmada, çözüme Adomian Ayrıştırma Metodu (ADM) kullanılarak ulaşıldı [58]. Mohebbi, A. ve ekibi, kuantum mekaniğinde karşılaşılan bir ve iki boyutlu zaman-kesirli mertebeden nonlinear Schrödinger denkleminde çözüm için nümerik metot kullandı. Kullanılan metotta, kesirli mertebeden zamana bağlı türe $O(\tau^{2-\alpha})$, $0 < \alpha < 1$ mertebesinde bir şema ile yaklaşım yapıldıktan sonra uzaysal (x) boyuttaki türe Kansa yaklaşımı ile yakınsama yapıldı. Bu çalışma, standart kuantum mekaniğinde ve birçok farklı mühendislik ve fizik probleminde başarıyla uygulanan Meshless metodunun, radyal taban fonksiyonları ve kolokasyon yaklaşımı tabanlı olarak, kesirli kuantum mekaniği problemlerine de uygulanabilirliğini gösterdi [91]. Meshless yaklaşımının, hareketli en küçük kareler, çekirdek fonksiyonları (Kernel) ve bütünü parçalamayı taban alan bir yaklaşım olduğunu burada hatırlamak gerekir. [6] te verilen çalışmada, Laplace dönüşümlerine uygun kesirli türevler içeren quantum mekaniği problemlerinin, küçük *sinc* fonksiyonlarını taban alan kolokasyon yaklaşımları kullanılmak ve Schrödinger denklemini düzgün ızgaralamak suretiyle nümerik çözümlerinin mümkün olduğu gösterildi. Herrmann, Riesz kesirli türev tanımını baz alarak sonsuz kuyu potansiyelindeki parçacık için Schrödinger denklemi geliştirdi [56].

BÖLÜM 6

SAYISAL YÖNTEMLER

Bu çalışmada ele alınan ve kısmi türevli kesirli mertebeden non-homojen lineer Schrödinger denklemi ile ifade edilen problemin nümerik çözümü Kompakt Sonlu Farklar Metodu ve enerji korumalı yöntemlerden Ortalama Vektör Alanı (OVA) Metodu ile çözülmüştür. Bu sebeple burada, bu metotlarla daha önce yapılmış çalışmalardan öne çıkanlara kısaca değindikten sonra metodların matematiksel formülasyonu ve özellikleri ile ilgili kısa teorik bilgi vermek uygun olacaktır.

6.1 KOMPAKT SONLU FARKLAR METODU

6.1.1 Kompakt Sonlu Farklar Metodu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar

Günümüze değin Kompakt Sonlu Farklar metodu kullanılarak oluşturulan şemaların kullanıldığı birçok çalışma yapılmıştır. Burada, bu konuda yapılmış çalışmalardan bazılarını örnek olarak vermek, bu metodun kullanım alanları hakkında bilgi verecektir.

Kompakt olmayan sonlu farklar şemalarıyla çözülmüş olan problem tipleri, sonraki yıllarda kompakt şemalar geliştirilerek daha yüksek doğruluk mertebesinde çözüldü. Hirish birinci ve ikinci türevlerin bilinmeyen olarak kabul edildiği yüksek mertebeden kompakt şemalar ile sayısal örnekler çözdü [59]. Forester yine bu metodu vurgulayan ve şemaların kompakt olarak kalmasına izin veren yük-

sek mertebeden filtre önerdi [44]. Hemker sapma düzeltmesi teknikleri için yüksek mertebeden doğrulukta yaklaşım yapan çok seviyeli (multi-level) şemaların belirli açılardan avantajlarını ortaya koydu [55].

Yüksek mertebeden kompakt (HOC) şemalarda, yapılan yaklaşımlar, standart merkezi farklar yaklaşımını $O(h^2)$ doğruluk mertebesinde $O(h^4)$ mertebesine yükseltir. Uzaysal boyutlardaki uygulamaları ilk olarak malzeme süreksizlikleri için MacKinnon ve Corey tarafından kullanıldı [82]. MacKinnon, Corey, Johnson ve Longerman benzer çalışmaları konveksiyon difüzyon problemleri için gerçekleştirdi [78, 79, 80, 81]. Yaklaşık aynı zamanlarda, Abarbonel ve Kumar HOC şemalar ile Euler denklemlerine çözümler geliştirdi [2]. Spatz ve Corey diferansiyel denklemlerin kullanılmasıyla kesme hatası terimlerine yaklaşım yapmak için yüksek mertebeden kompakt sonlu farklar şemaları geliştirdi. Bu çalışmayı Navier-Stokes denklemlerinin bir formu üzerinde gerçekleştirdi [115]. Gamet ve arkadaşları, düzgün olmayan ızgaralarda, birinci ve ikinci türevler için dördüncü dereceden kompakt şemalar geliştirdi [46]. Daha sonraları Zhao ve arkadaşları iki noktalı sınır değer problemlerinin genel formu ve iki boyutlu eliptik kısmi diferansiyel denklemleri için dördüncü mertebeden kompakt sonlu farklar şemaları geliştirip yakınsama ispatlarını yaptı [130]. Zhao ve arkadaşları ekonomi alanında kısmi diferansiyel denklem problemi olarak ifade edilen, Amerikan vade fiyatlandırma problemine hızlı ve yüksek doğrulukta çözüm üreten kompakt şemalar geliştirdi [129]. Nabavi ve arkadaşları bir ve iki boyutlu Helmholtz denklemlerine 9-noktalı, altıncı mertebeden doğruluğa sahip kompakt sonlu farklar şemaları geliştirerek metodun analizini yaptı [94]. Yine [76] deki çalışmada Neumann sınır koşulu için altıncı mertebeden doğrulukta simetrik gösterim geliştirildi. Düzleştirme (smooth) fonksiyonlarının türevlerinin kompakt şema ile hesaplanırken kullanılmak üzere sınır noktaları için yüksek mertebeli şemalar geliştirildi. Aynı konuda Oliveira ve Lu da çalıştı ve özellikle Dirichlet koşulu için şemalar geliştirdi [77]. Mohebbi ve Dehghan, iki boyutlu lineer Schrödinger denkleminin çözümü için yüksek mertebeden kompakt şemalar geliştirdi [89]. Liu ve arkadaşları implicit (kapalı) yaklaşımla geliştirdikleri dördüncü ve altıncı mertebeden kompakt şemalar ile jeodinamik simülasyonlarda kullanılan diferansiyel denklemleri çözdü [75].

Boersma sıkıştırılmayan Navier-Stokes ve iletim denklemleri için altıncı mertebeden kompakt şemalar geliştirdi [17].

Günümüze yaklaştıkça, kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin çözümünde de kompakt şemalar kullanılır oldu [4, 97, 121]. Gao ve Sun kesirli alt-difüzyon denklemleri için dördüncü mertebeden kompakt şemalar kullandı [47]. Rehman ve Khan ise çok noktalı sınır değer problemi olarak ele aldıkları kısmi türevli kesirli mertebeden diferansiyel denklemi için bu metodu kullandı [102]. Hu ve Zhang çalışmalarında ele aldıkları kesirli kısmi diferansiyel denklem olarak ifade edilen problem için aynı metodla türetilen diskritizasyon şemalarını kullandı [61, 128]. Zhao ve Corless yaptıkları çalışmada, lineer ve lineer olmayan yüksek mertebeden integro-diferansiyel denklemlere yüksek doğruluk kompakt şemalar geliştirerek çok iyi sonuçlar aldı [130]. Elconsul ve Lagha, Dirichlet ve/veya Neumann sınır koşuluna sahip bir boyutlu homojen olmayan Helmholtz denklemini, geliştirdikleri sekizinci mertebeye kadar kompakt şemalarla çözdü [35].

6.1.2 Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Matematiksel Formülasyonu

Yüksek mertebeden doğruluğa sahip diskritizasyon metotlarına karşı bir ilgi bulunmaktadır. Adi veya kısmi diferansiyel denklemlerin, standart sonlu farklar metotları kullanılarak yüksek doğrulukta sayısal çözümlerini elde etmenin bir yolu, daha küçük ızgara boyutları oluşturmak üzere düğüm noktası sayısını arttırmaktır. Ancak bu seçim daha uzun bir hesaplama süresi ve daha geniş bir depolama alanı gerektirir. Diğer bir yolu ise ızgara (düğüm) noktalarının bulunduğu hesaplama şablonunun genişlemesini gerektiren yüksek mertebeden şemalar kullanmaktır. Bu seçim ise hesaplamada kullanılan matrislerin band genişliğini arttıracığından çözümü yavaşlatır. Kısaca, Sonlu Farklar metoduyla yapılan yaklaşımlarda en önemli dezavantaj, yapılan yaklaşımın mertebesi arttıkça hesaplama şablonunun genişlemesidir. Bu geniş şablonlar, ele alınan problemin tanımlandığı aralığın kenarlarının yakınlarında daha da hantallaşır. Ancak kompakt şablonlar kullanılarak, küçük karmaşıklıkların da farklı yaklaşımlarla ele alınarak yok

edilmesiyle yüksek mertebeden sonlu fark yaklaşımları gerçekleştirmek mümkün olmaktadır. Bu sebeple, diferansiyel denklemlerin sayısal çözümlerinde kompakt sonlu fark şemaları tercih edilir.

Sonlu fark şemaları bilindiği gibi "implicit" (kapalı) ve "explicit" (açık) olarak sınıflandırılır. Açık şemalar, düğüm noktalarındaki türevlerini, fonksiyonların noktalardaki bilinen ağırlıklı değerlerinin toplamı şeklinde ifade ederler. Bu yaklaşımda, fonksiyonun bilinmeyen değerlerinden bilinen değerlerine ulaşılmaya çalışılır.

Kapalı şemalar ise düğüm noktalarındaki türevlerin ağırlıklı toplamlarını, fonksiyonu bilinen noktalardaki ağırlıklı değerlerinin toplamlarına eşitler. Bu yaklaşımda ise fonksiyonun bilinen değerlerinden bilinmeyen değerlerine gidilir.

Kapalı şemalar ile aynı hesaplama şablonu genişliğinde (stencil) küçük ölçekler için açık şemalara göre önemli ölçüde daha iyi yaklaşımlar yapmak mümkündür. Kapalı yaklaşımın doğruluğunun artışı bilinmeyen noktalardaki türevlere ait katsayılardan oluşan band matrisin tersinin alınması sırasında oluşur [74, 27, 69, 86]. Bu matrisler, tersini alma işlemi daha randımanlı olduğundan genellikle tridiagonal seçilir [114, 117]. Bu avantajları sebebiyle kompakt şemaların kapalı fark yaklaşımıyla kullanılması gerekir. Kompakt fark şemaları, küçük hesaplama şablonuyla yüksek mertebeden doğruluk sağlayan, yüksek mertebeli kapalı metotlardır ve bu sebeple hesaplamalı problemlerde çok geniş bir uygulama alanı bulmuştur. Düzenli konveksiyon-difüzyon problemleri [118, 127], Poisson denklemi [4, 97, 121] ve Helmholtz denklemleri [93, 119] bu uygulama alanlarına örnek verilebilir.

Kompakt fark şemalarının oluşturulması için birçok metod uygulanmakla birlikte iki temel yaklaşım ön plana çıkar.

1. Padé Yaklaşım Metodu (Pade Approximation Method) [12]
2. Taylor Serileri Metodu (Taylor Series Method) [116]

Bu iki yaklaşımdan biri kullanılarak farklı mertebelerden yaklaşım yapan, farklı sayıda terimleri olan birçok kompakt şema türetilir. Bu tez çalışmasında Taylor serileri metodu kullanılmıştır.

Burada Taylor seri açılımı ile ilgili bir hatırlatma yapmak gerekir. m keyfi bir tamsayı, $u_{i+m} = u(x_i + m)$ ve $u^{(n)}$, u fonksiyonunun x_i noktasında x e göre n inci türevi olmak üzere u_{i+m} değerinin x_i noktası etrafında Taylor seri açılımı

$$u_{i+m} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m\Delta x)^n}{n!} u^{(n)} \quad (6.1)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifadeden aşağıdaki toplam ve farklar kolaylıkla elde edilir.

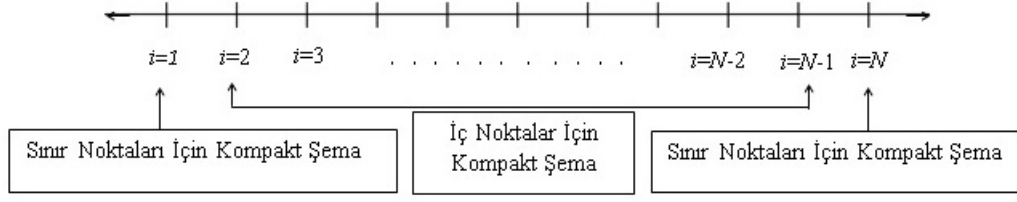
$$\frac{u_{i+m} + u_{i-m}}{2} = \sum_{n=0,2,4}^{\infty} \frac{(m\Delta x)^n}{n!} u^{(n)} \quad (6.2)$$

$$\frac{u_{i+m} + u_{i-m}}{2m} = \sum_{n=0,2,4}^{\infty} \frac{(m\Delta x)^n}{(n+1)!} u^{(n+1)} \quad (6.3)$$

Bu ifadeler fonksiyonun kendisine olduğu gibi türevlerine de uygulanabilir. Örneğin, denklem (6.1) de u yerine $u^{(1)}$ yazılırsa aynı ifade birinci türev için elde edilir.

$$\frac{u_{i+m}^{(1)} + u_{i-m}^{(1)}}{2} = \sum_{n=0,2,4}^{\infty} \frac{(m\Delta x)^n}{n!} u^{(n+1)} \quad (6.4)$$

Standart kompakt sonlu farklar formülasyonunda, bir fonksiyonun, tanımlı olduğu düğüm noktaları kümesindeki üç ardışık noktadaki değerleri, fonksiyonun aynı ardışık noktalardaki türev değerlerinin lineer kombinasyonu şeklinde ifade edilir. Üzerinde düzgün aralıklı bir ızgara tanımlanmış $[a, b]$ aralığında, i ile indekslenmiş N adet düğüm noktası düşünülürse $1 \leq i \leq N$ olmak üzere düzgün ızgara aralığı $h = (b - a)/(N - 1)$ şeklinde tanımlanır. Bu durumda ızgara üzerindeki düğüm noktaları, $a = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$ ve $x_{i+1} = x_i + ih$ olmak üzere fonksiyonun bu noktalardaki değerleri $f_i = f(x_i)$ şeklinde ifade edilir. Kompakt sonlu farklar şeması, sınır noktaları hariç içteki noktalar ve sınır koşullarına tabi sınırdaki noktalar için ayrı ayrı oluşturulur ve Şekil 6.1 deki gibi uygulanır.



Şekil 6.1: 1-D N adet düğüm noktasının oluşturduğu ızgarada kompakt şemaların uygulaması

Birinci Türev Yaklaşımı

i . düğüm noktasındaki f'_i birinci türevine yapılan sonlu farklar yaklaşımı, fonksiyonun i . noktasının komşusu olan noktalardaki değerlerine bağlıdır. Örneğin, f'_i yaklaşımı, ikinci mertebeden merkezi farklarda (f_{i-1}, f_{i+1}) kümesine, dördüncü mertebeden merkezi farklarda $(f_{i-2}, f_{i-1}, f_{i+1}, f_{i+2})$ kümesine bağlıdır. Bu genellemeler ve kısaltmalardan sonra fonksiyonun birinci türevine aşağıdaki formda bir yaklaşım yazılır.

$$\begin{aligned} \beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = \\ = c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \end{aligned} \quad (6.5)$$

a, b, c ve α, β katsayıları arasındaki ilişki Taylor serilerindeki aynı mertebeli terimlerin katsayılarının eşitlenmesiyle bulunur ve bu katsayıların sayısal değerleri hesaplanır. Genellikle tercih edilen tridiagonal şemalar, bu formülasyonda $\beta = 0$ seçildiğinde elde edilir. $c = 0$ seçimi ile de bir parametrelili (α) aileye ait, dördüncü mertebeden tridiagonal şemalar elde edilir [74]. Standart kompakt sonlu farklar formülünün katsayıları Taylor açılımı kullanılarak yüksek doğruluk elde edilecek şekilde belirlenir. Bu katsayılar belirlenirken uygulanan basit algoritmanın ana basamakları aşağıda belirtilmektedir.

1. İstenen kompakt sonlu farklar formülü bilinmeyen katsayılarıyla (6.5) deki gibi yazılır.

2. Denklem (6.5) in her iki tarafı x_i noktası etrafında diskritizasyon parametresi h cinsinden Taylor açılımı yapılarak genişletilir. Bu açılımlardaki terim sayısını istenen doğruluk mertebesi belirler.
3. Denklemdaki terimler her iki tarafta h in mertebesine göre gruplanır. Her iki tarafta aynı h mertebesine sahip terimler eşitlenerek elde edilen denklemlerden katsayılar belirlenir. Örneğin $O(h^6)$ mertebesinden bir yaklaşım yapıyorsak $h^j, j = 0, 1, \dots, 4, 5$ içeren terimlerden altı denklem elde edilerek katsayılar ulaşılır [130]. İlk eşleşmeyen katsayı lineer bağımlılığa sebep olacağından, yapılan yaklaşımın formal kesme hatasını belirler.

İkinci Türev Yaklaşımı

Birinci türev yaklaşımında olduğu gibi, i . düğüm noktasındaki f_i'' ikinci türevine yapılan sonlu farklar yaklaşımı, fonksiyonun i . noktasının komşusu olan noktalarındaki değerlerine bağlıdır. Fonksiyonun ikinci türevine aşağıdaki formda bir yaklaşım yapılır.

$$\begin{aligned} \beta f_{i-2}'' + \alpha f_{i-1}'' + f_i'' + \alpha f_{i+1}'' + \beta f_{i+2}'' &= \\ &= c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9h^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4h^2} + a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \end{aligned} \quad (6.6)$$

a, b, c ve α, β katsayıları arasındaki ilişki yine birinci türev yaklaşımında olduğu gibi Taylor serilerindeki aynı mertebeli terimlerin katsayılarının eşitlenmesiyle bulunur. $\beta = 0$ ve $c = 0$ seçimi ile de dördüncü mertebeden tridiagonal şemalar elde edilir.

Birinci Türev İçin Sınır Formülasyonu

Fonksiyonun birinci türevine $i = 1$ sınır değerinde yaklaşımda bulunmak için, eşitlik (6.5) te verilmiş olan iç noktalar için birinci türev yaklaşımına bağlı olarak, eşitlik (6.7) de görülen genel formülasyon verilir. Bu eşitlikle elde edilebi-

lecek şema, en az ikinci mertebeden bir doğruluğa sahiptir.

$$f'_1 + \alpha f'_2 = \frac{1}{h} (af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4) \quad (6.7)$$

Katsayılar yine Taylor serilerindeki aynı mertebeli terimlerin katsayılarının eşitlenmesiyle bulunarak $i = 1$ sınır değeri için sınır kompakt şeması elde edilir. Aynı şema, $i = N$ sınır koşulu varsa, bu nokta için de uyarlanır.

İkinci Türev İçin Sınır Formülasyonu

Fonksiyonun ikinci türevine $i = 1$ sınır değerinde yaklaşımda bulunmak için, eşitlik (6.7) ye benzer bir formülasyon olan genel kompakt sınır şeması, eşitlik (6.8) daki gibi yazılır.

$$f''_1 + \alpha f''_2 = \frac{1}{h^2} (af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4 + ef_5) \quad (6.8)$$

Katsayılar yine Taylor serilerindeki aynı mertebeli terimlerin katsayılarının eşitlenmesiyle bulunarak $i = 1$ sınır değeri için sınır kompakt şeması elde edilir. Aynı şema, $i = N$ sınır koşulu varsa, bu nokta için de uyarlanır [74].

6.2 ORTALAMA VEKTÖR ALANI (OVA) METODU (AVERAGE VECTOR FIELD - AVF)

6.2.1 Ortalama Vektör Alanı (OVA) Metodu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar

Adi ve kısmi diferansiyel denklemlerin sayısal integrasyonu için geliştirilen metodlar geleneksel olarak, sayısal stabiliteyi sağlayarak ve zaman adımlarını kontrol ederek global hatayı minimize etmek ile ilgilenmiştir. Son yirmi yılda ise sayısal metodların tasarımlarında, ele alınan problemlerin doğasında var olan simplektik yapı, simetriler, korunan nicelikler, hacim ve faz uzayı yapıları gibi geometrik özelliklerin korunması düzeyine çıkmıştır. Bu metodlar *geometrik* veya *yapıyı koruyan* metodlar olarak bilinmektedir [85]. Bu konuda yapılan bir çok çalışma, Hamiltonian adi ve kısmi diferansiyel denklemler için simplektik ve multi-simplektik

metodların oluşturulması üzerinde yoğunlaşmıştır [24, 42, 51, 65, 73, 108]. Bütün Runge-Kutta metodlarının birleştirilmiş diferansiyel denklemlerin lineer integrallerini koruduğu ve simplektik Runge-Kutta metodlarının da kuadratik integralleri koruduğu bilinmektedir. Hiçbir Runge-Kutta metodu yüksek mertebeden polinomsal veya lineer olmayan integralleri korumaz. Metod gerçek çözümler üretiyorsa, simplektik yapı ve Hamiltonianlar aynı anda korunamazlar [25, 51].

Enerji koruyan metodların gelişimi Courant, Friedrichs ve Lewy tarafından yapılan çalışmalarla başladı [28]. Yakın zamanlarda da adi diferansiyel denklemler için ayrık gradient ve ayrık varyasyonel türevler kullanan integral koruma metodlarına ilgi artmıştır [84, 100, 23, 21, 48, 99]. Ayrık gradient metodlar lineer olmayan evrimsel kısmi diferansiyel denklemlere de uygulandı [29, 45]. Geliştirilmiş kolokasyon metodlar ve Hamiltonian sınır değer metodları olarak bilinen ve polinomsal Hamiltonian sistemlerin enerjisini tamamen koruyan metodlar da geliştirilerek kullanıldı [62, 63].

Yukarıda sözü edilen tüm metodlar lineer olmadığı için bu metodlarla elde edilen sayısal çözümler, zaman boyutunda dönüşümler yapıldığında değişmez değildir. Ancak yakın dönemde, kapalı orta-nokta kurahının bir uzantısı olan ortalama vektör alanı (OVA) metodu çok ilgi çekmeye başladı [100, 83]. Gaussian quadrature kullanılarak yüksek mertebeden OVA metodları geliştirildi ve bunlar sürekli-adım Runge-Kutta metodları şeklinde yorumlandı. [26, 52] de verilen çalışmalarda kanonik ve kanonik olmayan Hamiltonian sistemler için keyfi yüksek mertebeden OVA metodu geliştirildi ve analizleri yapıldı. B-serisi metodlarıyla enerji korunumu ve simplektiklik arasında ilişki oluşturuldu. Ayrık gradient metodlar, Hamiltonian sistemlerin integrasyonunda kullanıldığında B-serilerine genişletilemezler. [42, 25] deki çalışmalarda kanonik Hamiltonian sistemler, enerji koruyan B-serisi metodlarıyla ele alındı. B-serileri kullanılarak, kanonik ve kanonik olmayan Hamiltonian sistemler için OVA metodunun simplektik veya Poisson metodların eşleniği olduğu gösterilebilir [26, 52]. Korteweg de Vries denklemi, lineer olmayan Schrödinger denklemi, sine-Gordon denklemi gibi birçok kısmi diferansiyel denklem, kanonik olmayan Hamiltonian veya Poisson sistemleri olarak

yeniden hesaplanıp düzenlenebilir ve OVA metodu uygulanabilir. Son yirmi yılda, simplektik ve multi-simplektik metodlar, Hamiltonian kısmi diferansiyel denklemlere, integralleri koruyarak ve uzun zaman dilimlerinde iyi derecede doğruluklar elde edilerek başarıyla uygulandı. [34] deki çalışmada, birçok lineer olmayan kısmi diferansiyel denklemlere OVA metodu uygulandığı görülmektedir.

6.2.2 Ortalama Vektör Alanı (OVA) Metodu Formülasyonu

Bu bölümde Hamiltonian sistemler için OVA metoduna ait özellikler ve metodun formülasyonu anlatılırken [65, 5, 22] de verilen referanslardan yararlanılmıştır.

Enerji korumalı diferansiyel denklemler genellikle, $H(y)$ Hamiltonian fonksiyonunun yeterince diferansiyellenebilir olması kabulü ile $f(y) = J(y)\nabla H(y)$ şeklinde verilir. $J(y)$ ters simetrik, $n \times n$ boyutlu sabit bir matris ve $H(y)$ ise Hamiltonian başka bir deyişle sistemin enerjisi olan değişmez olmak üzere, aşağıdaki adi diferansiyel denklem sistemi ele alınsın.

$$y' = f(y), \quad y(0) = y_0 \in R^n \quad (6.9)$$

Enerji koruyan ayrık gradient metodlar $\nabla H(y)$ ve $J(y)$ nin uygun yaklaşımlarına dayanır. Poisson sistemleri için simetrik ayrık gradient metodlar aşağıdaki gibi verilmektedir [84, 100].

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{h} = J \left(\frac{y^n + y^{n+1}}{2} \right) \cdot \bar{\nabla} H_s (y^n, y^{n+1}) \quad (6.10)$$

$$\bar{\nabla} H_s (y^n, y^{n+1}) := \frac{1}{2} (\bar{\nabla} H_s (y^n, y^{n+1}) + \bar{\nabla} H_s (y^{n+1}, y^n)) \quad (6.11)$$

Eşitlik (6.11) deki ifade daha açık bir şekilde koordinat artışları ile birlikte aşağıdaki şekilde gösterilir.

$$\bar{\nabla} H_s(y^n, y^{n+1}) := \begin{pmatrix} \frac{H(y_1^{n+1}, y_2^n, \dots, y_i^n, \dots, y_m^n) - H(y_1^n, y_2^n, \dots, y_i^n, \dots, y_m^n)}{y_1^{n+1} - y_1^n} \\ \dots \\ \frac{H(y_1^{n+1}, y_2^{n+1}, \dots, y_i^{n+1}, \dots, y_m^n) - H(y_1^{n+1}, y_2^{n+1}, \dots, y_i^n, \dots, y_m^n)}{y_i^{n+1} - y_i^n} \\ \dots \\ \frac{H(y_1^{n+1}, y_2^{n+1}, \dots, y_i^{n+1}, \dots, y_m^{n+1}) - H(y_1^{n+1}, y_2^{n+1}, \dots, y_i^{n+1}, \dots, y_m^n)}{y_m^{n+1} - y_m^n} \end{pmatrix}$$

Enerji koruyan metodların bir başka sınıfı da polinom halinde olan Hamiltonianlar için geliştirilmiş olan s-adımlı yamuk (trapezoidal) metodlardır ve eşitlik (6.12) deki gibi tanımlanır [62, 63].

$$y^{n+1} = y^n + h \sum_{i=1}^s b_i J(K_i) \nabla H(K_i) \quad (6.12)$$

Yukarıdaki tanım $s = 1$ değeri için düzenlenecek olursa *implicit orta nokta kuralı* elde edilir. Dördüncü mertebeden 3-adım yöntemi eşitlik (6.13) de görüldüğü gibi verilir [63].

$$y^{n+1} = y^n + \frac{h}{6} \left(J(y^n) \nabla H(y^n) + 4J\left(\frac{y^n + y^{n+1}}{2}\right) \nabla H\left(\frac{y^n + y^{n+1}}{2}\right) + J(y^{n+1}) \nabla H(y^{n+1}) \right) \quad (6.13)$$

Sözü edilen bu metodların lineer olmaması sebebiyle bu metodlarla elde edilen sayısal çözümler, lineer dönüşümler altında değişkendir. Başka bir deyişle, bu sayısal çözümler lineer dönüşümler uygulandığında sabit kalmaz ve genellikle B-serisi olarak ifade edilemezler. Eşitlik (6.9) da verilen diferansiyel denklem sistemi için Runge-Kutta metodunun genişletilmesi ile B-serisi olarak ifade edilebilen (OVA) *ortalama vektör alanı metodu* eşitlik (6.14) de görüldüğü gibi ifade edilir. OVA metodu, lineer dönüşümler altında değişmez olma özelliğine sahiptir ve kanonik Hamiltonian sistemler için indirgenerek ayrık gradient metoda dönüşür.

$$y^{n+1} = y^n + h \int_0^1 f(y^n + \tau(y^{n+1} - y^n)) d\tau, \quad n = 0, 1, \dots \quad (6.14)$$

Kanonik Hamiltonian sistemler için oluşturulan OVA metodu (6.15) de görülmektedir [26].

$$y^{n+1} = y^n + hJ \int_0^1 \nabla H(y^n + \tau(y^{n+1} - y^n)) d\tau \quad (6.15)$$

Lineer enerji koruyan OVA metodu Poisson sistemler için, eşitlik (6.15) de verilen kanonik Hamiltonian sistemler için geliştirilen OVA metodunun genişletilmesiyle elde edilir [52].

$$y^{n+1} = y^n + hJ \left(\frac{y^n + y^{n+1}}{2} \right) \int_0^1 \nabla H (y^n + \tau (y^{n+1} - y^n)) d\tau \quad (6.16)$$

OVA metodu [26, 5] deki referanslarda Gaussian quadrature kullanılarak Gauss-Legendre Runge-Kutta metodlarına benzer şekilde yapılandırılmıştır ve bu haliyle sürekli-adım Runge-Kutta metodları olarak yorumlanır. $\tau \in (0, 1)$ için

$$Y_\tau = y^n + h \int_0^1 a_{\tau,\sigma} f(Y_\sigma) d\sigma, \quad y^{n+1} = y^n + h \int_0^1 b_\sigma f(Y_\sigma) d\sigma \quad (6.17)$$

şeklinde yazılır [52]. Burada $c_\tau = \int_0^1 a_{\tau,\sigma} d\sigma$ olmak üzere $Y_\tau \approx y(t_n + c_\tau h)$ olarak ifade edilir. Y_σ integral adımları, $y(t_n + c_\tau h)$ polinomsal değerlerine karşılık gelir ve katsayılar

$$c_\tau = \tau, \quad a_{\tau,\sigma} = \sum_{i=1}^s \frac{1}{b_i} \int_0^\tau l_i(\alpha) l_i(\sigma), \quad b_\sigma = 1 \quad (6.18)$$

şeklinde verilir. Burada l_i ve b_i eşitlik (6.19) da görüldüğü gibi, c_1, \dots, c_s kolokasyon noktalarındaki Lagrange interpolasyonunun baz polinomlarıdır.

$$l_i(\tau) = \prod_{j=1, j \neq i}^s \frac{\tau - c_j}{c_i - c_j}, \quad b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau \quad (6.19)$$

Kanonik ve kononik olmayan $2s$ çift mertebeli Hamiltonian sistemler için Gaussian quadrature kullanılarak daha yüksek mertebeli lineer integral koruyan OVA metodları geliştirilmiştir [26, 52, 5]. Örneğin $c_1 = 1/2$ ile tek-adım Gaussian kolokasyon metodu olarak OVA metodu, kapalı orta nokta kuralının genişletilmiş halidir.

$$c_{1,2} = 1/2 \mp \sqrt{3}/6, \quad l_1(\tau) = (\tau - c_2)/(c_1 - c_2), \quad l_2(\tau) = (\tau - c_1)/(c_2 - c_1)$$

için dördüncü mertebeden iki-adım Gaussian OVA metodu eşitlik (6.20) deki formda verilir [26, 5].

$$Y_1 = y^n + h \int_0^1 \left(\frac{1}{2} l_1(\sigma) B(Y_1) + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3} \right) l_2(\sigma) B(Y_2) \right) \nabla H(Y_\sigma) d\sigma$$

$$Y_2 = y^n + h \int_0^1 \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) l_1(\sigma) B(Y_1) + \frac{1}{2} l_2(\sigma) B(Y_2) \right) \nabla H(Y_\sigma) d\sigma$$

$$y^{n+1} = y^n + h \int_0^1 (l_1(\sigma) B(Y_1) + l_2(\sigma) B(Y_2)) \nabla H(Y_\sigma) d\sigma \quad (6.20)$$

Gaussian OVA metodları zamana göre simetriktir ve simplektik metodların eşleniğidir. $y^{n+1} = \Phi_h(y^n)$ şeklindeki tek-adım sayısal bir metod, $y^{n+1} = \Phi_{-h}(y^n)$ koşulunu sağladığında, zamana göre simetriktir ve Hamiltonian sistemler gibi tersine çevrilebilir sistemlere uygulanabilir. OVA metodları zamana göre simetriktir. Hamiltonian sistemlerde enerjiyi tam anlamıyla koruyan OVA metodları gibi B-serisi metodları da simplektik değildir. Fakat $2s$ mertebeden OVA metodları, $2s + 2$ mertebeye kadar eşlenik-simplektiktir. Bu da $\Psi_h^{-1} \circ \phi_n \circ \Psi_h$ simplektik olma koşuluyla $\Psi(y) = y + O(h^{2s})$ koordinatlarının değiştirilebilmesi anlamına gelir [52].

BÖLÜM 7

SAYISAL ÖRNEKLER

7.1 KOMPAKT SONLU FARKLAR METODUNUN SAYISAL ÖRNEKLERE UYGULANMASI

Bir fonksiyonun ele alınan noktalar kümesi dahilinde birinci ve ikinci türevlerine ait iç noktalar ve sınır noktaları için kompakt sonlu farklar şemaları oluşturuldu. Oluşturulan bu şemalar, bunlar ile elde edilen katsayı matrisleri ve bu matrislerin kullanılışı aşağıda verilmektedir.

$u(x)$ fonksiyonunun birinci türevine ait kompakt sonlu farklar formülasyonu ile elde edilen ve kesme hatası $O(h^5)$ mertebesinde olan yaklaşım şeması, $u'_i = \frac{du(x_i)}{dx}$ olmak üzere eşitlik (7.1) de görülmektedir. ve bu şemaya ait kesme hatası $O(h^5)$ mertebesinde dir.

$$\frac{h}{3}(u'_{i-1} + 4u'_i + u'_{i+1}) = -u_{i-1} + u_{i+1} \quad (7.1)$$

$u(x)$ fonksiyonunun ikinci türevine ait kompakt sonlu farklar formülasyonu ile elde edilen ve kesme hatası $O(h^6)$ mertebesinde olan yaklaşım şeması ise $u''_i = \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}$ olmak üzere eşitlik (7.2) de görülmektedir.

$$\frac{h^2}{12}(u''_{i-1} + 10u''_i + u''_{i+1}) = u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} \quad (7.2)$$

Kompakt sonlu farklar formülünün katsayıları, yüksek mertebeden doğruluk elde etmek üzere Taylor açılımları kullanılarak belirlendi. Eşitlik (7.1) deki bi-

linmeyen katsayılar, $h^j, j = 0, 1, \dots, 4$ şeklinde olduğundan beş adettir. Bu katsayıların belirlenmesi için 5 adet lineer bağımsız denklem elde edildi ve her biri sıfıra eşitlenerek, $O(h^5)$ mertebesinde bir doğruluk ile bu katsayılar belirlendi. Eşitlik (7.2) deki katsayılar ise $h^j, j = 0, 1, \dots, 4, 5$ şeklinde olduğundan altı adet bilinmeyen katsayının belirlenmesi için elde edilen altı adet denklem, lineer bağımlı olduğundan çözülemedi. Bu yüzden ilk 6 parametre için ilk beş denklem kullanıldı. Kısaca kesme hatası, şemanın diğer tarafında h^6 içeren terimin karşılığı olmadığından, $O(h^6)$ mertebesinde gerçekleşti.

$i = 1$ ve $i = N$ sınır değerleri bilinen problemler ele alınacağından (7.1) ve (7.2) de verilmiş olan birinci ve ikinci türev için elde edilen şemalar, Şekil 7.1 de görüldüğü gibi $i = 3$ den $i = N - 2$ ye kadar olan iç noktalar için kullanıldı. $i = 1$ ve $i = N$ sınır değerleri bilindiğinden, çözümün sınır değerlerine ait şeması birinci türev için $i = 2$ noktasında kullanılmak üzere eşitlik (7.3) de verildiği gibi elde edildi.

$$\frac{h}{3}(-17u'_1 - 14u'_2 + u'_3) = u_0 + 8u_1 - 9u_2 \quad (7.3)$$

Birinci türev için $i = N - 1$ noktasında kullanılmak üzere elde edilen sınır değerlerine ait şema ise eşitlik (7.4) deki gibi elde edildi. (7.3) ve (7.4) de verilen şemalar $O(h^5)$ mertebesinde doğruluğa sahiptir.

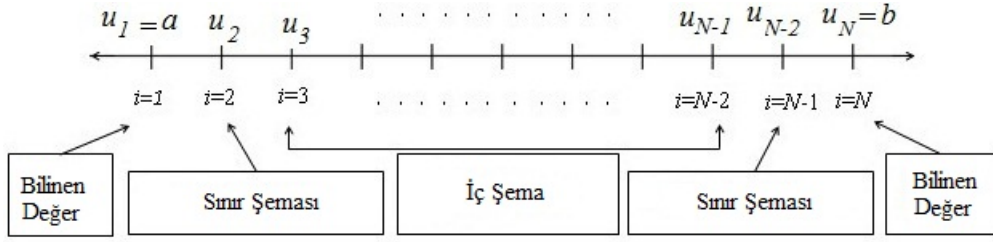
$$\frac{h}{3} \left(\frac{1}{8}u'_{N-3} - \frac{5}{8}u'_{N-2} + \frac{19}{8}u'_{N-1} + \frac{9}{8}u'_N \right) = -u_{N-1} + u_N \quad (7.4)$$

Çözümün sınır değerlerine ait şeması ikinci türev için $i = 2$ noktasında kullanılmak üzere eşitlik (7.5) de verildiği gibi elde edildi.

$$\frac{h^2}{12}(14u''_1 - 5u''_2 + 4u''_3 - 5u''_4) = u_0 - 2u_i + u_{i+1} \quad (7.5)$$

İkinci türev için $i = N - 1$ noktasında kullanılmak üzere elde edilen sınır değerlerine ait şema ise eşitlik (7.6) deki gibi elde edildi. (7.5) ve (7.6) de verilen şemalar $O(h^6)$ mertebesinde doğruluğa sahiptir. Bu şemaların probleme uygulanışı Şekil 7.1 de görülmektedir.

$$\frac{h^2}{12}(-u''_{N-4} + 4u''_{N-3} - 5u''_{N-2} + 14u''_{N-1}) = u_{N-2} - 2u_{N-1} + u_N \quad (7.6)$$



Şekil 7.1: 1-D N adet düğüm noktasının oluşturduğu ızgarada iç noktalar ve sınır kompakt şemaların uygulanışı

Yukarıda verilen şemaların $N = 7$ nokta için uygulanışı ve matrislerin oluşturulması aşağıda gösterildiği gibi olmaktadır.

İç Noktalara Birinci Türev Yaklaşım Şemasının Uygulanışı:

$$i = 2 \text{ için: } \frac{h}{3}(u'_1 + 4u'_2 + u'_3) = -u_1 + u_3$$

$$i = 3 \text{ için: } \frac{h}{3}(u'_2 + 4u'_3 + u'_4) = -u_2 + u_4$$

$$i = 4 \text{ için: } \frac{h}{3}(u'_3 + 4u'_4 + u'_5) = -u_3 + u_5$$

Sınır Noktalarına Birinci Türev Yaklaşım Şemalarının Uygulanışı:

$$i = 1 \text{ için: } \frac{h}{3}(-17u'_1 - 14u'_2 + u'_3) = u_0 + 8u_1 - 9u_2$$

$$i = 5 \text{ için: } \frac{h}{3}\left(\frac{1}{8}u'_2 - \frac{5}{8}u'_3 + \frac{19}{8}u'_4 + \frac{9}{8}u'_5\right) = -u_4 + u_5$$

Bu şemalardan birinci türev için elde edilen matrisler ise aşağıda görülmektedir.

$$A_1 = \begin{bmatrix} -\frac{17h}{3} & -\frac{14h}{3} & \frac{h}{3} & 0 & 0 \\ \frac{h}{3} & \frac{4h}{3} & \frac{h}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h}{3} & \frac{4h}{3} & \frac{h}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{h}{3} & \frac{4h}{3} & \frac{h}{3} \\ 0 & \frac{h}{24} & \frac{-5h}{24} & \frac{19h}{24} & \frac{9h}{24} \end{bmatrix} \quad U' = \begin{bmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ u'_3 \\ u'_4 \\ u'_5 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad K_1 = \begin{bmatrix} 8 & -9 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad H_1 = \begin{bmatrix} u_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Bu matrisler kullanılarak eşitlik (7.7) yardımıyla fonksiyonun N adet noktadaki U' birinci türev değerleri hesaplandı.

$$A_1 U' = K_1 U + H_1 \quad (7.7)$$

Eşitlik (7.7) de U' ve U bilinmeyenlerinin hesaplanabilmesi için bilinen A_1 matrisine LU ayrıştırma tekniği uygulandı ve diğer işlemler aşağıdaki şekilde gerçekleştirildi.

$$(L_0 U_0) U' = K_1 U + H_1 \quad (7.8)$$

$$L_0^{-1} L_0 U_0 U' = L_0^{-1} K_1 U + L_0^{-1} H_1$$

$$T_1 = L_0^{-1} K_1 \quad (7.9)$$

$$G_1 = L_0^{-1} H_1 \quad (7.10)$$

$$U_0 U' = T_1 U + G_1 \quad (7.11)$$

$$U_0^{-1} U_0 U' = U_0^{-1} T_1 U + U_0^{-1} G_1$$

$$S_1 = U_0^{-1} G_1 \quad (7.12)$$

$$U' = C_1 U + S_1 \quad (7.13)$$

Eşitlik (7.13) problemde U' yaklaşımı için kullanılacak matrisleri içermektedir. Benzer işlemler ikinci türev için de aşağıda görüldüğü şekilde gerçekleştirildi.

İç Noktalara İkinci Türev Yaklaşım Şemasının Uygulanışı:

$$i = 2 \text{ için: } \frac{h^2}{12}(u_1'' + 10u_2'' + u_3'') = u_1 - 2u_2 + u_3$$

$$i = 3 \text{ için: } \frac{h^2}{12}(u_2'' + 10u_3'' + u_4'') = u_2 - 2u_3 + u_4$$

$$i = 4 \text{ için: } \frac{h^2}{12}(u_3'' + 10u_4'' + u_5'') = u_3 - 2u_4 + u_5$$

Sınır Noktalarına İkinci Türev Yaklaşım Şemalarının Uygulanışı:

$$\begin{aligned} i = 1 \text{ için: } & \frac{h^2}{12}(14u_1'' - 5u_2'' + 4u_3'' - 5u_4'') = u_0 - 2u_1 + u_2 \\ i = 5 \text{ için: } & \frac{h^2}{12}(-u_1'' + 4u_2'' - 5u_3'' + 14u_4'') = u_4 - 2u_5 + u_6 \end{aligned}$$

Bu şemalardan ikinci türev için elde edilen matrisler ise aşağıda görülmektedir.

$$A_2 = \begin{bmatrix} \frac{14h^2}{12} & -\frac{5h^2}{12} & \frac{4h^2}{12} & -\frac{h^2}{12} & 0 \\ \frac{h^2}{12} & \frac{10h^2}{12} & \frac{h^2}{12} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h^2}{12} & \frac{10h^2}{12} & \frac{h^2}{12} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{h^2}{12} & \frac{10h^2}{12} & \frac{h^2}{12} \\ 0 & -\frac{h^2}{12} & \frac{4h^2}{12} & -\frac{5h^2}{12} & \frac{14h^2}{12} \end{bmatrix} \quad U'' = \begin{bmatrix} u_1'' \\ u_2'' \\ u_3'' \\ u_4'' \\ u_5'' \end{bmatrix}$$
$$U = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad K_2 = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad H_2 = \begin{bmatrix} u_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ u_6 \end{bmatrix}$$

Bu matrisler kullanılarak eşitlik (7.14) yardımıyla fonksiyonun N adet noktadaki U'' ikinci türev değerleri hesaplanır.

$$A_2 U'' = K_2 U + H_2 \quad (7.14)$$

Eşitlik (7.14) de U'' ve U bilinmeyenlerinin hesaplanabilmesi için bilinen A_2 matrisine LU ayrıştırma tekniği uygulandı ve diğer işlemler birinci türev için yapılan işlemlere benzer şekilde gerçekleştirildi. Eşitlik (7.20) problemde U'' yaklaşımı için kullanılacak matrisleri içermektedir.

$$(L_0 U_0) U'' = K_2 U + H_2 \quad (7.15)$$

$$L_0^{-1} L_0 U_0 U'' = L_0^{-1} K_2 U + L_0^{-1} H_2$$

$$T_2 = L_0^{-1} K_2 \quad (7.16)$$

$$G_2 = L_0^{-1} H_2 \quad (7.17)$$

$$U_0 U'' = T_2 U + G_2 \quad (7.18)$$

$$U_0^{-1} U_0 U'' = U_0^{-1} T_2 U + U_0^{-1} G_2$$

$$S_2 = U_0^{-1} G_2 \quad (7.19)$$

$$U'' = C_2 U + S_2 \quad (7.20)$$

Yukarıda elde edilen kompakt sonlu farklar şemaları, doğruluklarının izlenmesi amacıyla önce basit örneklere daha sonra kesirli mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklemlere uygulandı. Problemlerin çözümlerinde MATLAB R2012b kullanıldı.

7.1.1 Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Adi ve Kısmi Türevli Tamsayılı Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması

ÖRNEK 7.1:

$$u_{xx} + u_x = f(x) \quad (7.21)$$

Adi homojen olmayan diferansiyel denklemiyle $0 \leq x \leq 1$ aralığında tanımlanan problemde $f(x) = -2x - 1$ ve sınır koşulları $u(0) = 0$ ve $u(1) = 0$ olarak verilmektedir. Probleme ait analitik çözüm ise $u(x) = -x^2 + x$ şeklindedir.

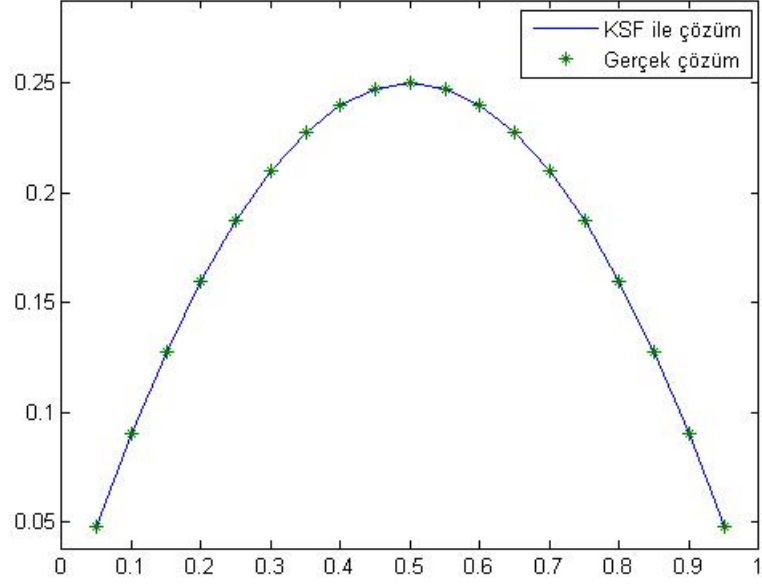
Yukarıda elde edilen şemalar uygulanarak eşitlik (7.21) yeniden düzenlendiğinde eşitlik (7.24) elde edildi.

$$C_1 U + S_1 + C_2 U + S_2 = f(x) \quad (7.22)$$

$$(C_1 + C_2) U = f(x_i) - S_1(i) - S_2(i) \quad (7.23)$$

$$U = \text{inv}(C_1 + C_2) [f(x_i) - S_1(i) - S_2(i)] \quad (7.24)$$

Çözümüne ait grafik Şekil 7.2 de görülmektedir. Bu çözüme ait hata ise $N = 21$ nokta için $2.4147e^{-15}$ olarak elde edildi.



Şekil 7.2: Örnek 7.1 in $N = 21$ nokta için çözüm grafiği

ÖRNEK 7.2:

Bir boyutlu konveksiyon-difüzyon adi homojen olmayan diferansiyel denklemini $0 \leq x \leq \pi$ aralığında $\psi(0) = 0$ ve $\psi(\pi) = 0$ sınır koşullarıyla verilmektedir.

$$a(x)\psi + b(x)\frac{d\psi}{dx} - c(x)\frac{d^2\psi}{dx^2} = d(x) \quad (7.25)$$

Eşitlik (7.25) deki katsayı fonksiyonları (7.26) daki gibidir.

$$a(x) = 1, \quad b(x) = 1, \quad c(x) = 1, \quad d(x) = \cos(x) + 2\sin(x) \quad (7.26)$$

Probleme ait analitik çözüm ise $\psi(x) = \sin(x)$ fonksiyonudur.

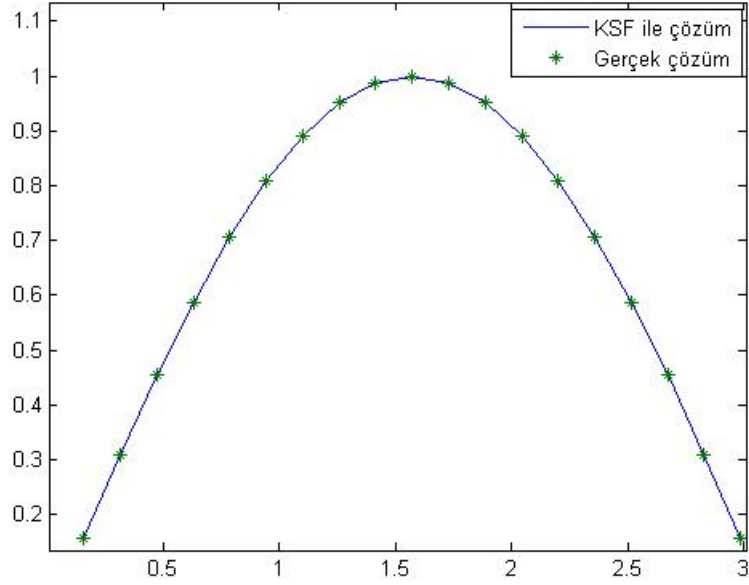
Yukarıda elde edilen şemalar uygulanarak eşitlik (7.25) yeniden düzenlendiğinde eşitlik (7.28) ve (7.29) elde edildi.

$$U + C_1U + S_1 - (C_2U + S_2) = d(x) \quad (7.27)$$

$$(I + C_1 - C_2)U = d(x_i) - S_1(i) + S_2(i) \quad (7.28)$$

$$U = \text{inv}(I + C_1 - C_2) [f(x_i) - S_1(i) + S_2(i)] \quad (7.29)$$

Çözümüne ait grafik Şekil 7.2 de görülmektedir. Bu çözüme ait hata ise $N = 21$ nokta için $2.0694e^{-06}$ olarak elde edildi.



Şekil 7.3: Örnek 7.2 nin $N = 21$ nokta için çözüm grafiği

ÖRNEK 7.3:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - 4 \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (7.30)$$

Kısmi türevli homojen diferansiyel denklem sınıfından olan ve eşitlik (7.30) da verilen ısı denklemi $0 \leq x \leq 2$ uzaysal ve $0 \leq t \leq 1$ zaman aralığında tanımlanmıştır. Problemde sınır koşulları $u(0, t) = \frac{t}{2}$ ve $u(2, t) = 4 + \frac{t}{2}$, başlangıç koşulu da $u(x, 0) = x^2$ olarak verilmektedir. Probleme ait analitik çözüm ise $u(x, t) = x^2 + \frac{t}{2}$ şeklindedir.

Uzaysal boyutta yukarıda elde edilen ikinci türev için iç ve sınır kompakt şemaları, zaman boyutunda da zaman adımı $\Delta t = k = 0.001$ alınarak sonlu farklar şemaları, kapalı yaklaşımla uygulanarak, eşitlik (7.30) yeniden düzenlendiğinde eşitlik (7.35) elde edildi.

$$C_2 U^j + S_2 = 4 \left(\frac{u_i^j - u_i^{j-1}}{k} \right) \quad (7.31)$$

$$\frac{k}{4} C_2 u_i^j + \frac{k}{4} S_2(i) = u_i^j - u_i^{j-1} \quad (7.32)$$

$$U_i^j - \frac{k}{4} C_2 U_i^j = \frac{k}{4} S_2(i) + u_i^{j-1} \quad (7.33)$$

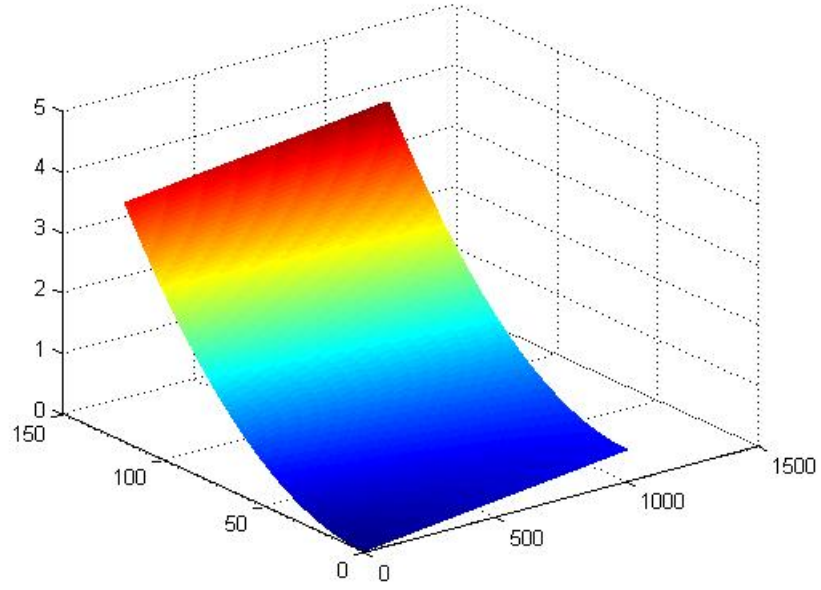
$$\left(I - \frac{k}{4} C_2 \right) U_i^j = \frac{k}{4} S_2(i) + u_i^{j-1} \quad (7.34)$$

$$U_i^j = inv \left(I - \frac{k}{4} C_2 \right) \left[\frac{k}{4} S_2(i) + u_i^{j-1} \right] \quad (7.35)$$

H_1 ve H_2 vektörlerinde bilinen sınır değerleri aşağıdaki gibi yerine yazılır ve böylece C_2 matrisinin hesaplanması işlemine katılmış oldu.

$$H_1 = \begin{bmatrix} t/2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad H_2 = \begin{bmatrix} t/2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 4 + t/2 \end{bmatrix}$$

Çözüme ait grafik Şekil 7.4 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.1 de gösterilmiştir.



Şekil 7.4: Örnek 7.3 ün $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	5.7732e-15	7.7049e-13	6.3660e-12
0.01	5.7732e-15	5.8664e-13	9.5670e-12
0.001	2.1938e-13	2.2071e-13	7.7378e-12

Tablo 7.1: Örnek 7.3 e ait hata değerleri (KSF Metodu)

ÖRNEK 7.4:

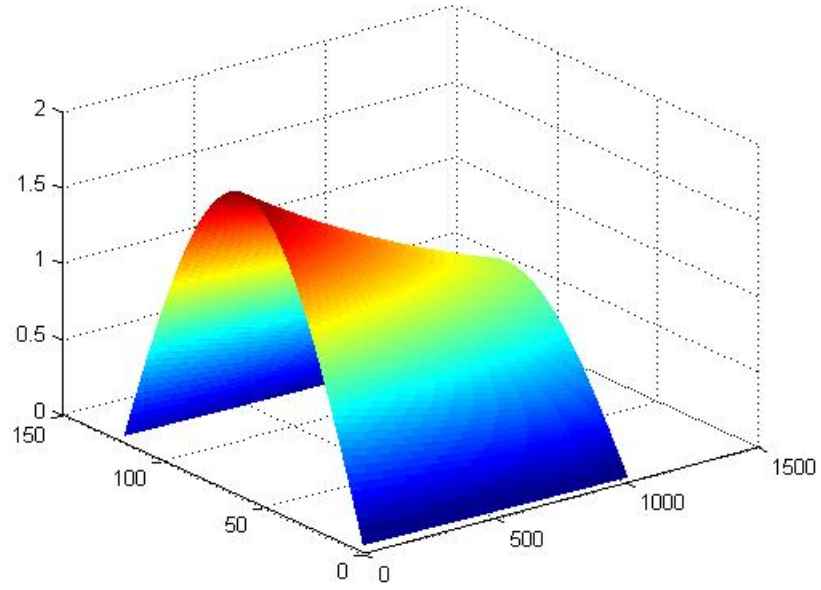
Eşitlik (7.30) da verilen $u_{xx} - 4u_t = 0$ homojen ısı denklemi yine $0 \leq x \leq 2$ uzaysal ve $0 \leq t \leq 1$ zaman aralığında ancak farklı sınır koşullarıyla ele alındı. Probleme sınır koşulları $u(0, t) = 0$ ve $u(2, t) = 0$, başlangıç koşulu da $u(x, 0) = 2 \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$ olarak verilmektedir. Probleme ait analitik çözüm ise $u(x, t) = 2 \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) e^{-\pi^2 t/16}$ şeklindedir.

Uzaysal boyutta yukarıda elde edilen ikinci türev için iç ve sınır kompakt şemaları, zaman boyutunda da zaman adımı $\Delta t = k = 0.001$ alınarak sonlu farklar

şemaları, kapalı yaklaşımı uygulanarak, yine örnek 7.3 te olduğu gibi düzenlenirse eşitlik (7.30) yeniden düzenlenerek eşitlik (7.36) elde edildi.

$$U_i^j = \text{inv} \left(I - \frac{k}{4} C_2 \right) \left[\frac{k}{4} S_2(i) + u_i^{j-1} \right] \quad (7.36)$$

H_1 ve H_2 vektörlerinde bilinen sınır değerleri yerine sıfır yazılacağı da burada hatırlanmalıdır. Çözüme ait grafik şekil 7.5 de görülmektedir. Çözüme ait grafik Şekil 7.5 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.2 de gösterilmiştir.



Şekil 7.5: Örnek 7.4 ün $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.0199	0.0199	0.0199
0.01	0.0020	0.0020	0.0020
0.001	2.0677e-04	2.0677e-04	2.0677e-04

Tablo 7.2: Örnek 7.4 e ait hata değerleri (KSF Metodu)

ÖRNEK 7.5:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (7.37)$$

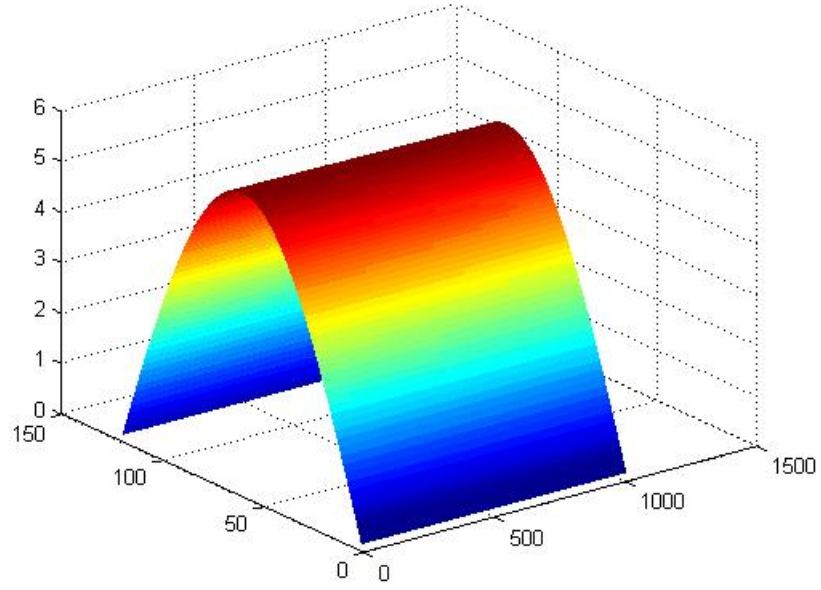
Kısmi türevli homojen diferansiyel denklem sınıfından olan eşitlik (7.37) de verilen ısı denklemi $0 \leq x \leq 1$ uzaysal ve $0 \leq t \leq 1$ zaman aralığında tanımlanmıştır. Problemde sınır koşulları $u(0, t) = f(x)$ ve $u(1, t) = 0$, başlangıç koşulu da $u(x, 0) = f(x)$ ve $f(x) = 6 \sin(\pi x)$ olarak verilmektedir. Probleme ait analitik çözüm ise $u(x, t) = 6 \sin(\pi x)e^{-k\pi^2 t}$ şeklindedir.

Uzaysal boyutta kompakt şemalar ve zaman boyutunda da sonlu farklar şeması, kapalı yaklaşımla uygulanarak eşitlik (7.37) yeniden düzenlendi ve eşitlik (7.38) elde edildi.

$$U_i^j = inv(I - k^2 C_2) [k^2 S_2(i) + u_i^{j-1}] \quad (7.38)$$

H_2 vektöründe bilinen sınır değerleri aşağıdaki gibi yerine yazıldı ve böylece C_2 matrisinin hesaplanması işlemine katılmış oldu. Çözüme ait grafik Şekil 7.6 da, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.3 de gösterilmiştir.

$$H_2 = \begin{bmatrix} 6 \sin(\pi x) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$



Şekil 7.6: Örnek 7.5 in $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.1046	0.1046	0.1046
0.01	2.6595e-04	2.6460e-04	2.6460e-04
0.001	5.3047e-07	2.8947e-07	2.8935e-07

Tablo 7.3: Örnek 7.5 e ait hata değerleri (KSF Metodu)

ÖRNEK 7.6:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (7.39)$$

Kısmi türevli homojen diferansiyel denklem sınıfından olan eşitlik (7.39) de verilen ısı denklemi $0 \leq x \leq 1$ uzaysal ve $0 \leq t \leq 1$ zaman aralığında tanımlanmıştır. Probleme sınır koşulları $u(0, t) = 0$ ve $u(1, t) = \sin(\pi)e^{-\pi^2 t}$, başlangıç koşulu da $u(x, 0) = \sin(\pi x)$ olarak verilmektedir. Probleme ait analitik çözüm ise $u(x, t) = \sin(\pi x)e^{-\pi^2 t}$ şeklindedir.

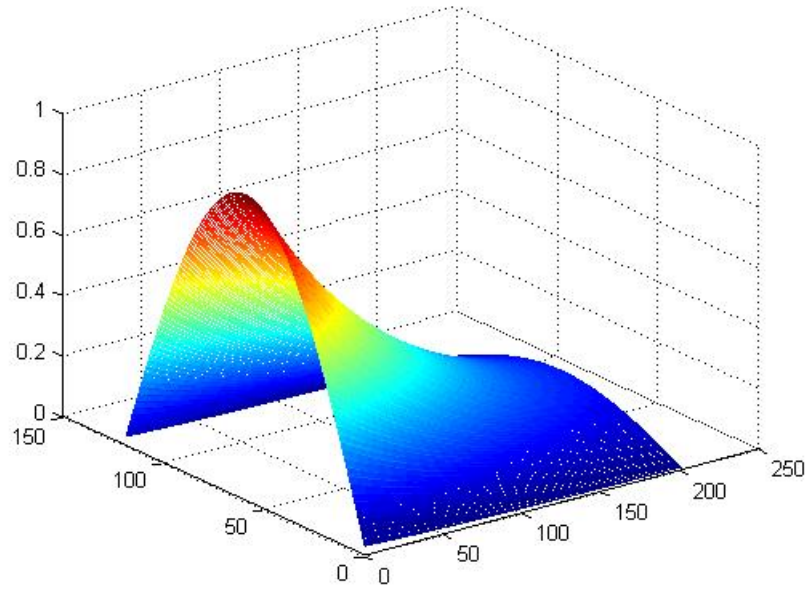
Uzaysal boyutta kompakt şemalar ve zaman boyutunda da sonlu farklar şeması, kapalı yaklaşımla uygulandı ve eşitlik (7.39) yeniden düzenlenerek, eşitlik (7.40) elde edildi.

$$U_i^j = inv(I - kC_2) [kS_2(i) + u_i^{j-1}] \quad (7.40)$$

H_1 ve H_2 vektörlerinde bilinen sınır değerleri aşağıdaki gibi yerine yazıldı ve böylece C_2 matrisinin hesaplanması işlemine katılmış oldu.

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad H_2 = \begin{bmatrix} t/2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sin(\pi)e^{-\pi^2 t} \end{bmatrix}$$

Çözüme ait grafik Şekil 7.7 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.4 te gösterilmiştir.



Şekil 7.7: Örnek 7.6 nın $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.1306	0.1306	0.1306
0.01	0.0174	0.0174	0.0174
0.001	0.0018	0.0018	0.0018

Tablo 7.4: Örnek 7.6 ya ait hata değerleri (KSF Metodu)

7.1.2 Kompakt Sonlu Farklar Metodunun Kısmi Türevli Kesirli Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması

ÖRNEK 7.7:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = d(x) \frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial x^\alpha} + q(x, t) \quad (7.41)$$

Kısmi türevli uzay-kesirli mertebeden homojen olmayan diferansiyel denklem sınıfından olan eşitlik (7.41) de verilen difüzyon denklemi $0 \leq x \leq 1$ uzaysal ve $0 \leq t$ zaman koşuluyla tanımlanmıştır. Problemden sınır koşulları $u(0, t) = g_0(t)$ ve $u(1, t) = g_1(t)$, başlangıç koşulu da $u(x, 0) = f(x)$ olarak verilmektedir. $f(x) = x^3$ olarak kullanılacaktır. Difüzyon katsayısı fonksiyonu $d(x) = \frac{\Gamma(2.2)x^{2.8}}{6}$ ve kaynak/alıcı (source/sink) fonksiyonu $q(x, t) = -(1+x)e^{-t}x^3$ olarak tanımlanmaktadır. Kaynaklar sisteme enerji veya materyal sağlarken, alıcı sistemden enerji veya materyal absorbe eder. Probleme ait analitik çözüm ise tamsayı türev mertebesi $\alpha = 2$ için $u(x, t) = e^{-t}x^3$ şeklindedir.

Caputo Kesirli Türev Tanımının Probleme Uygulanması:

Eşitlik (3.32) ile verilen Caputo kesirli türev tanımı, problem uzaysal boyutta kesirli mertebeden türev içerdiğinden aşağıdaki şekilde ifade edildi.

$$({}^C D_a^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x \frac{u^{(n)}(\mu)}{(x-\mu)^{\alpha-n+1}} d\mu, \quad [\alpha] < n < [\alpha+1] \quad (7.42)$$

Aşağıda Caputo kesirli türev tanımının eşitlik (7.42) ile verilen problemin uzay-kesirli mertebeden türevli kısmına uygulanışı adım adım gösterilmektedir. Tanımdaki

koşul gereği $n = 2$ alınarak uygulandığında (7.43) elde edildi.

$$\frac{\partial^{1.8}u(x,t)}{\partial x^{1.8}} = \frac{1}{\Gamma(0.2)} \int_a^{x_i} \frac{u^{(2)}(\mu)}{(x_i - \mu)^{0.8}} d\mu \quad (7.43)$$

$$\frac{\partial^{1.8}u(x,t)}{\partial x^{1.8}} = \frac{1}{\Gamma(0.2)} \int_a^{x_i} (x_i - \mu)^{-0.8} u_i''(\mu) d\mu \quad (7.44)$$

Eşitlik (7.44) deki integral içeren bölüme arka arkaya iki kez kısmi integral kuralı uygulandı ve

$$\frac{\partial^{1.8}u(x,t)}{\partial x^{1.8}} = \frac{1}{\Gamma(0.2)} \frac{36}{25} \int_0^{x_i} (x_i - \mu)^{-2.8} u_i(\mu) d\mu \quad (7.45)$$

elde edildi. (7.45) te görülen $u_i(\mu)$ ifadesi $\mu = x_i$ noktası civarında aşağıdaki gibi Taylor serisine açılarak yerine yazıldı.

$$u_i(\mu) \approx u(x_i, t) + \frac{u'(x_i, t)}{1!} (x_i - \mu) + \frac{u''(x_i, t)}{2!} (x_i - \mu)^2 + \dots \quad (7.46)$$

$$\frac{\partial^{1.8}u(x,t)}{\partial x^{1.8}} = \quad (7.47)$$

$$= \frac{1}{\Gamma(0.2)} \frac{36}{25} \int_0^{x_i} (x_i - \mu)^{-2.8} \left\{ u(x_i, t) + \frac{u'(x_i, t)}{1!} (x_i - \mu) + \frac{u''(x_i, t)}{2!} (x_i - \mu)^2 \right\} d\mu$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{1.8}u(x,t)}{\partial x^{1.8}} &= \frac{1}{\Gamma(0.2)} \frac{36}{25} \left[\underbrace{u(x,t) \int_0^{x_i} (x_i - \mu)^{-2.8} d\mu}_A + \right. \\ &\quad \left. + u'(x,t) \underbrace{\int_0^{x_i} (x_i - \mu)^{-1.8} d\mu}_B + \right. \\ &\quad \left. + \frac{u''(x,t)}{2} \underbrace{\int_0^{x_i} (x_i - \mu)^{-0.8} d\mu}_C \right] \quad (7.48) \end{aligned}$$

$$A := -\frac{x_i^{-1.8}}{1.8} \quad B := -\frac{x_i^{-0.8}}{0.8} \quad C := -\frac{x_i^{0.8}}{0.4}$$

olmak üzere $u(x)$ in ve türevlerinin h a bağlı katsayıları aşağıdaki gibi hesaplandı.

$$a := -\frac{2\Gamma(2.2)}{15\Gamma(0.2)} \quad b := -\frac{3\Gamma(2.2)}{10\Gamma(0.2)} \quad (7.49)$$

Caputo kesirli türev tanımının kullanılmasıyla (7.41) de verilen uzay-kesirli mer-
tebeden kısmi türevli diferansiyel denklem, aşağıda görüldüğü gibi kısmi türevli
tamsayıli mertebeden diferansiyel denklem haline dönüştürüldü.

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = ax_i u(x,t) + bx_i^2 u'(x,t) - 2x_i^3 b u''(x,t) + q(x,t) \quad (7.50)$$

Problemın Diskritizasyonu:

Eşitlik (7.50) de ele alınan problemi ifade eden denklemin, zaman boyu-
tunda sonlu farklar şeması ve uzaysal boyutta da fonksiyonun birinci ve ikinci
türevlerine ait (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.5) ve (7.6) da elde edilmiş olan kom-
pakt şemalarla ve kapalı yaklaşımla diskritizasyonu aşağıda görülmektedir.

$$\frac{u_i^j - u_i^{j-1}}{k} - \left(ax_i u_i^j(x, t) + bx_i^2 u_i^{j'}(x, t) - 2bx_i^3 u_i^{j''}(x, t) \right) = q(x_i, t) \quad (7.51)$$

$$u_i^j(x, t) - kax_i u_i^j(x, t) - kbx_i^2 u_i^{j'}(x, t) + 2kbx_i^3 u_i^{j''}(x, t) = kq(x_i, t) + u_i^{j-1}(x, t) \quad (7.52)$$

$$(1 - kax_i)U - kbx_i^2(C_1U + S_1) + 2kbx_i^3(C_2U + S_2) = kq(x_i, t) + u_i^{j-1}(x, t) \quad (7.53)$$

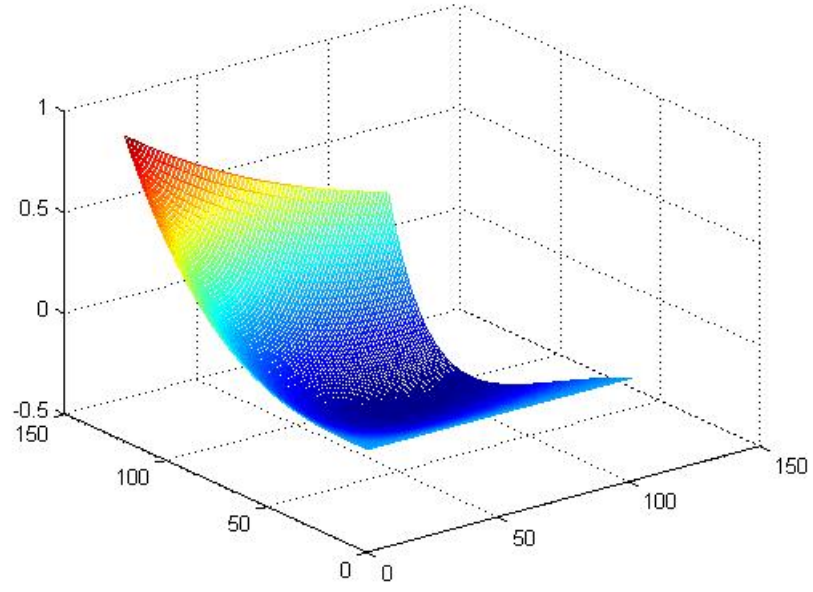
Eşitlik (7.52) de gerekli düzenlemeler yapılarak diskritizasyon şemasının son hali
aşağıdaki gibi elde edildi.

$$\left[(1 - kax_i)I - kbx_i^2C_1 + 2kbx_i^3C_2 \right] u_i^j(x, t) = kq(x_i, t) + u_i^{j-1}(x, t) + kbx_i^2S_1(i) - 2kbx_i^3S_2(i) \quad (7.54)$$

H_1 ve H_2 vektörlerinde bilinen sınır değerleri aşağıdaki gibi yerine yazıldı ve
böylece bu değerler C_1 ve C_2 matrislerinin hesaplanması işlemine katılmış oldu.

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad H_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{-t} \end{bmatrix}$$

Çözüme ait grafik Şekil 7.8 de görülmektedir. Problemin çözümünde, kesirli
türev mertebesi $\alpha = 1.8$ olarak alındı ve $\alpha = 2$ tamsayılı mertebeden analitik
çözüm sonucuyla karşılaştırılarak hata hesabı yapıldı. Bu çözüme ait farklı sayıda
nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.5 te gösterilmiştir.



Şekil 7.8: Örnek 7.7 nin $N = 121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.1199	0.0565	0.0772
0.01	0.5837	0.1990	0.0357
0.001	0.8121	0.7334	0.4060

Tablo 7.5: Örnek 7.7 ye ait hata değerleri (KSF Metodu)

7.1.3 OVA Metodunun Kısmi Türevli Tamsayılı Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması

ÖRNEK 7.9: - *Örnek 7.3 e OVA Metodu Uygulanması*

Örnek 7.3 te eşitlik (7.30) ile verilen denklem, $\frac{du(x,t)}{dt} = u_t$ ve $\frac{d^2u(x,t)}{dx^2} = u_{xx}$ kısa gösterimleriyle (7.93) deki gibi tekrar ifade edilerek metod uygulandı. Metodun uygulanarak eşitlik (7.96) da verilen diskritizasyon şemasının kapalı yaklaşımla elde edilişi aşağıda görülmektedir.

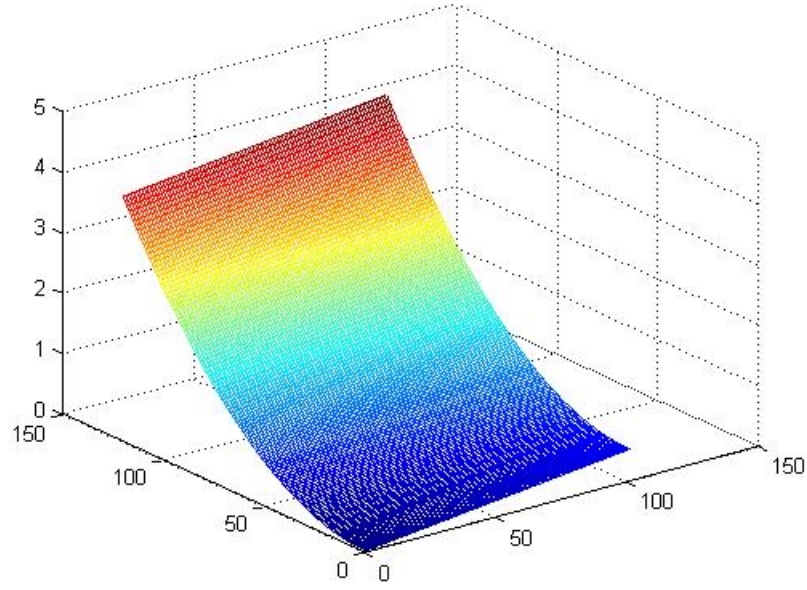
$$u_t = \frac{u_{xx}}{4} \quad (7.55)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = \frac{1}{4h^2} (u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) \quad (7.56)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = \frac{1}{4h^2} \left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i-1}^{j+1}}{2} - 2 \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} \right] \quad (7.57)$$

$$-\frac{1}{8h^2}u_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{4h^2}\right)u_i^{j+1} - \frac{1}{8h^2}u_{i+1}^{j+1} = \frac{1}{8h^2}u_{i-1}^j + \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{4h^2}\right)u_i^j + \frac{1}{8h^2}u_{i+1}^j \quad (7.58)$$

Çözüme ait grafik Şekil 7.15 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.7 de gösterilmiştir.



Şekil 7.9: Örnek 7.9 un $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği

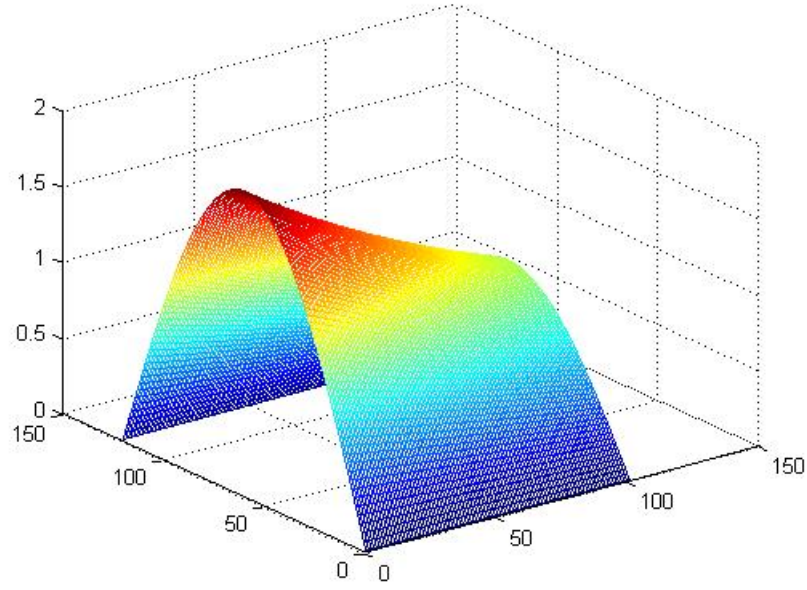
k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	4.8850e-15	4.8517e-14	3.3572e-12
0.01	2.9976e-15	1.0036e-13	2.6823e-12
0.001	1.9362e-13	3.8358e-14	2.7915e-12

Tablo 7.6: Örnek 7.9 a ait hata değerleri (OVA Metodu)

ÖRNEK 7.10: - *Örnek 7.4 e OVA Metodu Uygulanması*

Örnek 7.3 te eşitlik (7.30) ile verilen ve eşitlik (7.87) de daha kısa biçimde gösterilen denklem, Örnek 7.4 te aynı uzaysal ve zaman aralığında ancak farklı sınır koşullarıyla ele alınarak çözülmüştü. Probleme, OVA metodu uygulandığında elde edilen şema eşitlik (7.96) da verilmektedir.

Çözüme ait grafik Şekil 7.16 da, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.8 de gösterilmiştir.



Şekil 7.10: Örnek 7.10 un $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.0012	1.7315e-04	2.0918e-04
0.01	0.0014	3.5914e-05	2.0039e-06
0.001	0.0014	1.0036e-13	8.6013e-08

Tablo 7.7: Örnek 7.10 a ait hata değerleri (OVA Metodu)

ÖRNEK 7.11: - Örnek 7.5 e OVA Metodu Uygulanması

Örnek 7.5 te eşitlik (7.37) ile verilen denklem, $\frac{du(x,t)}{dt} = u_t$ ve $\frac{d^2u(x,t)}{dx^2} = u_{xx}$ kısa gösterimleriyle (7.97) deki gibi tekrar ifade edilerek metod uygulandı. Metodun uygulanarak eşitlik (7.100) de verilen diskritizasyon şemasının kapalı yaklaşımla elde edilmesi aşağıda görülmektedir.

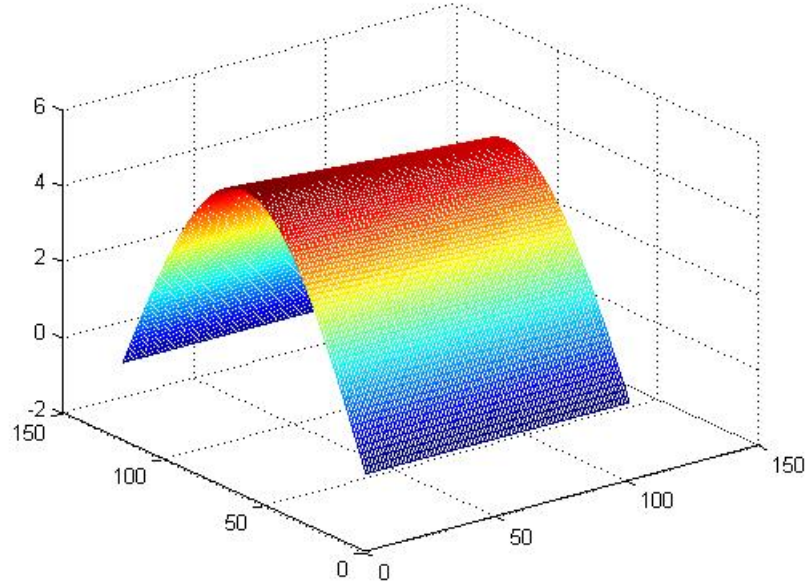
$$u_t = ku_{xx} \quad (7.59)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = k(u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) \quad (7.60)$$

$$\frac{u_i^{j+1}-u_i^j}{k} = \frac{k}{h^2} \left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i-1}^{j+1}}{2} - 2 \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} \right] \quad (7.61)$$

$$-\frac{k}{2h^2}u_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{1}{k} + \frac{k}{h^2}\right)u_i^{j+1} - \frac{k}{2h^2}u_{i+1}^{j+1} = \frac{k}{2h^2}u_{i-1}^j + \left(\frac{1}{k} - \frac{k}{h^2}\right)u_i^j + \frac{k}{2h^2}u_{i+1}^j \quad (7.62)$$

Çözümüne ait grafik Şekil 7.17 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.9 da gösterilmiştir.



Şekil 7.11: Örnek 7.11 in $N=121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.0028	0.0017	0.0018
0.01	0.0011	3.0600e-05	1.5884e-06
0.001	1.2047e-04	3.3490e-06	1.7835e-07

Tablo 7.8: Örnek 7.11 e ait hata değerleri (OVA Metodu)

ÖRNEK 7.12: - Örnek 7.6 ya OVA Metodu Uygulanması

Örnek 7.6 da eşitlik (7.39) ile verilen denklem eşitlik (7.101) deki gibi yazılarak metod uygulandı. Metodun uygulanarak eşitlik (7.104) de verilen diskritizasyon şemasının kapalı yaklaşım ile elde edilmesi aşağıda görülmektedir.

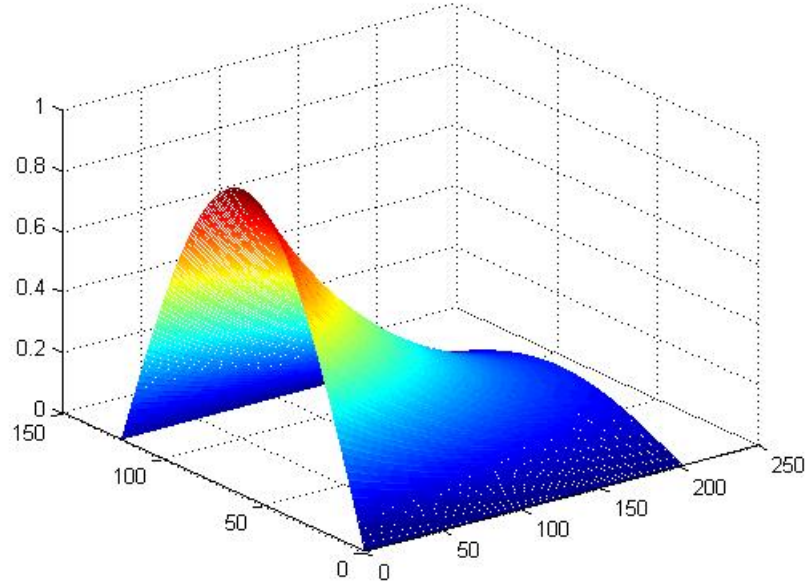
$$u_t = u_{xx} \quad (7.63)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = k(u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) \quad (7.64)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = \frac{1}{h^2} \left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i+1}^j}{2} - 2 \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} \right] \quad (7.65)$$

$$-\frac{1}{2h^2}u_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h^2}\right)u_i^{j+1} - \frac{1}{2h^2}u_{i+1}^{j+1} = \frac{1}{2h^2}u_{i-1}^j + \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{h^2}\right)u_i^j + \frac{1}{2h^2}u_{i+1}^j \quad (7.66)$$

Çözüme ait grafik Şekil 7.18 de, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.10 da gösterilmiştir.



Şekil 7.12: Örnek 7.12 nin $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.0326	0.0335	0.0336
0.01	4.5882e-04	2.7787e-04	2.9779e-04
0.001	7.5360e-04	1.8026e-05	1.8673e-06

Tablo 7.9: Örnek 7.12 ye ait hata değerleri (OVA Metodu)

7.1.4 OVA Metodunun Kısmi Türevli Kesirli Mertebeden Diferansiyel Denklemlere Uygulanması

ÖRNEK 7.13: - *Örnek 7.7 ye OVA Metodu Uygulanması*

Örnek 7.7 de eşitlik (7.41) ile verilen kısmi türevli uzay-kesirli mertebeden homojen olmayan diferansiyel denklem sınıfından olan difüzyon denklemi, bu örnekte de aynı sınır ve başlangıç koşulları ve $\alpha = 1.8$ kesirli türev mertebesi ile ele alındı. Caputo kesirli türev tanımı kullanılarak, eşitlik (7.41) de verilen uzay-kesirli mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklem eşitlik (7.50) de

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = ax_i u(x, t) + bx_i^2 u'(x, t) - 2x_i^3 bu''(x, t) + q(x, t)$$

şeklinde elde edilen tamsayıli mertebeden kısmi türevli diferansiyel denklem haline dönüştürüldükten sonra denkleme uzaysal boyutta ileri farklar metodu ve zaman boyutunda OVA metodu uygulanarak çözüldü. Eşitlik (7.50) nin eşitlik (7.105) de daha kısa ve yeniden düzenlenmiş halde gösterilmesinin ardından metodların uygulanmasıyla elde edilen diskritizasyon şeması eşitlik (7.108) de verilmiştir.

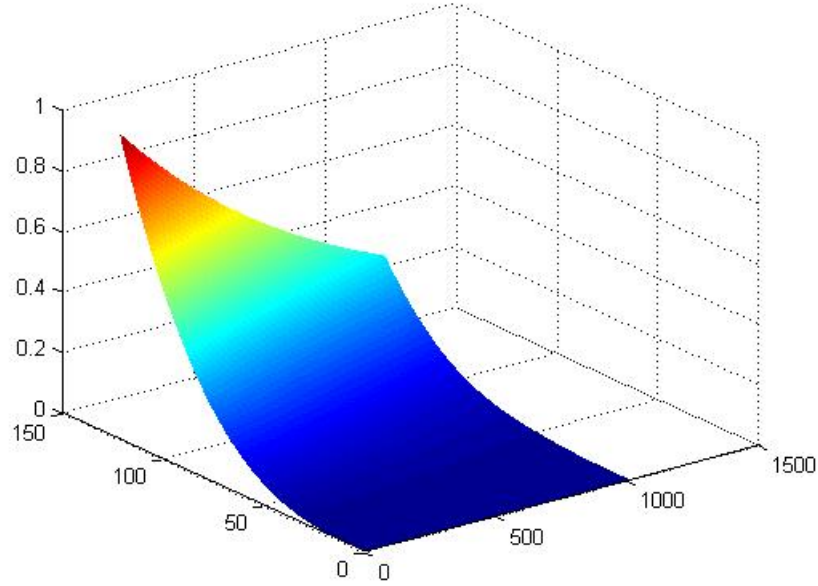
$$u_t = q(x, t) - 2bx_i^3 u_{xx} + bx_i^2 u_x + ax_i u \quad (7.67)$$

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = q(x, t) - \frac{2bx_i^3}{h^2} (u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) + \frac{bx_i^2}{h} (u_{i+1}^j - u_i^j) + ax_i u \quad (7.68)$$

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = & q(x, t) - \frac{2bx_i^3}{h^2} \left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i-1}^{j+1}}{2} - 2 \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} \right] + \\ & + \frac{bx_i^2}{h} \left[\frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} - \frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right] + ax_i \left[\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right] \end{aligned} \quad (7.69)$$

$$\begin{aligned} & \frac{bx_i^3}{h^2} u_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{1}{k} - \frac{2bx_i^3}{h^2} + \frac{bx_i^2}{2h} - \frac{ax_i}{2} \right) u_i^{j+1} + \left(\frac{bx_i^3}{h^2} - \frac{bx_i^2}{2h} \right) u_{i+1}^{j+1} = \quad (7.70) \\ & = q(x, t) - \frac{bx_i^3}{h^2} u_{i-1}^j + \left(\frac{1}{k} + \frac{2bx_i^3}{h^2} - \frac{bx_i^2}{2h} + \frac{ax_i}{2} \right) u_i^j + \left(-\frac{bx_i^3}{h^2} + \frac{bx_i^2}{2h} \right) u_{i+1}^j \end{aligned}$$

Çözümüne ait grafik Şekil 7.19 da, farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 7.11 de gösterilmiştir. Tabloda görülen değerler mutlak hata şeklinde hesaplanırsa da aslında sadece metodun uygunluğunu göstermektedir. Çünkü bu değerler $\alpha = 1.8$ için elde edilen çözümün, $\alpha = 2$ için verilen gerçek çözüm ile kıyaslanmasıyla elde edildi.



Şekil 7.13: Örnek 7.13 ün $N=121$ nokta ve $k=0.001$ için çözüm grafiği

k	$N = 21$	$N = 121$	$N = 521$
0.1	0.0178	0.0175	0.0222
0.01	0.0126	0.0264	0.0314
0.001	0.0122	0.0273	0.0324

Tablo 7.10: Örnek 7.13 e ait hata değerleri (OVA Metodu)($\alpha = 2$ ile kıyaslandı)

BÖLÜM 8

KISMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN LİNEER SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ

$$i \frac{\partial^\alpha \psi(x, t)}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = g(x, t) \quad (8.1)$$

Lineer homojen olmayan kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden Schrödinger Denklemi $\alpha = 0.3$ seçimiyle eşitlik (8.1) de verilmektedir.

$$g(x, t) = -\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sin(x) - t^2 \cos(x) + i \left(\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \cos(x) - t^2 \sin(x) \right) \quad (8.2)$$

$0 \leq x \leq 2\pi$ uzaysal ve $0 \leq t \leq 1$ zaman aralıklarına tanımlanan problemin sayısal çözümü (8.3) deki gibidir.

$$\psi(x, t) = t^2 (\cos(x) + i \sin(x)) \quad (8.3)$$

$\Delta t = k = 1/1000$ olmak üzere, kompleks bir fonksiyon ve/veya kesirli ya da tamsayılı mertebeden türevleri arasındaki bir ilişki olan Schrödinger denklemiyle ifade edilen problemde, sınır ve başlangıç koşulları da denklemin gerçel ve sanal kısımları için aşağıda görüldüğü gibi ayrı ayrı verilmektedir.

$$u(0, t) = \psi_{gercel}(0, t) = t^2 \quad (8.4)$$

$$u(2\pi, t) = \psi_{gercel}(2\pi, t) = t^2 \cos(2\pi) \quad (8.5)$$

$$v(0, t) = \psi_{sanal}(0, t) = 0 \quad (8.6)$$

$$v(2\pi, t) = \psi_{sanal}(2\pi, t) = t^2 \sin(2\pi) \quad (8.7)$$

$$u(x, 0) = \psi_{gercel}(x, 0) = 0 \quad (8.8)$$

$$v(x, 0) = \psi_{sanal}(x, 0) = 0 \quad (8.9)$$

$\psi(x, t)$ fonksiyonu, gerçel ve sanal kısımları ile yeniden aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\psi(x, t) = u(x, t) + iv(x, t) \quad (8.10)$$

Yukarıda görülen ve daha önce [123] da refere edilen Wei ve arkadaşlarının ele aldığı problem, homojen ve non-homojen olmak üzere iki durum için KSF ve OVA metodları ile çözüldü. Denklemin diskrtizasyonundan önce gerçel ve sanal kısımları ayrılarak problem bir denklem çifti haline getirildi. Daha sonra kesirli mertebeden türev içeren kısımlarına Caputo kesirli türev tanımı uygulanarak bu kısımlar tamsayıli mertebeden türevler kombinasyonu şeklinde ifade edildi. Bu aşamadan sonra KSF ve OVA metodları probleme uygulandı.

8.1 KOMPAKT SONLU FARKLAR (KSF) METODU İLE ÇÖZÜMÜ

1. DURUM: Problemin Non-homojen Denklem Olarak Ele Alınması:

Problemin Denklem Çifti Haline Getirilmesi:

Eşitlik (8.10) kısaca (8.11) deki gibi gösterilebilir.

$$\psi = u + iv \quad (8.11)$$

$$\begin{aligned} i \frac{\partial^\alpha(u + iv)}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2(u + iv)}{\partial x^2} &= \\ &= -\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sin(x) - t^2 \cos(x) + i \left(\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \cos(x) - t^2 \sin(x) \right) \end{aligned} \quad (8.12)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \cos(x) - t^2 \sin(x) \\ -\frac{\partial^\alpha v}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sin(x) - t^2 \cos(x) \end{cases} \quad (8.13)$$

Eşitlik (8.2) nin gerçel ve sanal kısımları kısa gösterim amacıyla aşağıdaki gibi ayrıldı.

$$g(x, t) = \underbrace{-\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \sin(x) - t^2 \cos(x)}_A + i \underbrace{\left(\frac{2t^{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)} \cos(x) - t^2 \sin(x) \right)}_B \quad (8.14)$$

$$i \frac{\partial^\alpha (u + iv)}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 (u + iv)}{\partial x^2} = A + iB \quad (8.15)$$

Problemin denklem çifti olarak kısaca gösterimi (8.16) daki gibidir.

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = B \\ -\frac{\partial^\alpha v}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = A \end{cases} \quad (8.16)$$

Caputo Kesirli Türev Tanımının Probleme Uygulanması:

Caputo kesirli türev tanımının eşitlik (8.16) da elde edilen denklem çiftinin zaman-kesirli mertebeden türevli kısımlarına uygulanışı aşağıda gösterilmektedir.

Kesirli türevlerin mertebesi $\alpha = 0.3$ olduğundan, tanımdaki koşul gereği $n = 1$ alınarak uygulandı ve eşitlik (8.18) elde edildi.

$$\frac{\partial^{0.3} u(x, t)}{\partial t^{0.3}} = \frac{1}{\Gamma(0.7)} \int_0^{t_i} \frac{u^{(1)}(\mu)}{(t_i - \mu)^{0.3}} d\mu \quad (8.17)$$

$$\frac{\partial^{0.3} u(x, t)}{\partial t^{0.3}} = \frac{1}{\Gamma(0.7)} \int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{-0.3} u'_i(\mu) d\mu \quad (8.18)$$

Eşitlik (8.16) deki integral içeren bölüme bir kez kısmi integral kuralı uygulanarak

$$\frac{\partial^{0.3} u(x, t)}{\partial t^{0.3}} = \frac{3}{10\Gamma(0.7)} \int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{-1.3} u_i(\mu) d\mu \quad (8.19)$$

elde edildi. (8.19) da görülen $u_i(\mu)$ ifadesi, $\mu = t_i$ noktası civarında aşağıdaki gibi Taylor serisine açılarak yerine yazıldı.

$$u_i(\mu) \approx u(x, t_i) + \frac{u'(x, t_i)}{1!}(t_i - \mu) + \frac{u''(x, t_i)}{2!}(t_i - \mu)^2 + \dots \quad (8.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{0.3}u(x, t)}{\partial t^{0.3}} &= \quad (8.21) \\ &= \frac{3}{10\Gamma(0.7)} \int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{-1.3} \left\{ u(x, t_i) + \frac{u'(x, t_i)}{1!}(t_i - \mu) + \frac{u''(x, t_i)}{2!}(t_i - \mu)^2 \right\} d\mu \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{0.3}u(x, t)}{\partial t^{0.3}} &= \\ &= \frac{3}{10\Gamma(0.7)} \left[\underbrace{u(x, t_i) \int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{-1.3} d\mu}_P \right. \\ &\quad + \underbrace{u'(x, t_i) \int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{-0.3} d\mu}_R \\ &\quad \left. + \frac{u''(x, t_i)}{2} \underbrace{\int_0^{t_i} (t_i - \mu)^{0.7} d\mu}_S \right] \quad (8.22) \end{aligned}$$

olmak üzere $u(x, t)$ nin ve türevlerinin $\Delta t = k$ ya bağlı katsayıları aşağıdaki gibi elde edildi.

$$P := \frac{10}{3}t_i^{-0.3}, \quad R := -\frac{10}{7}t_i^{0.7}, \quad S := -\frac{10}{17}t_i^{1.7} \quad (8.23)$$

Eşitlik (8.16) da elde edilen denklem çiftindeki gerçel kısmı sembolize eden u fonksiyonu için yapılan Caputo kesirli türev uygulamasının aynısı, denklem çiftindeki sanal kısmı sembolize eden v fonksiyonu için de geçerlidir.

Kısalık için $m := \frac{3}{10\Gamma(0.7)}$ kabulü ile eşitlik (8.16) da verilen denklem çifti, u ve v fonksiyonlarının Caputo kesirli türev uygulaması sonucunda elde edilen hali kullanılarak aşağıdaki şekilde yeniden yazıldı.

$$\begin{cases} -m \left[P u_i^j + R \frac{\partial u_i^j}{\partial t} + \frac{S}{2} \frac{\partial^2 u_i^j}{\partial t^2} \right] + \frac{\partial^2 v_i^{j+1}}{\partial x^2} = B_i^j \\ m \left[P v_i^j + R \frac{\partial v_i^j}{\partial t} + \frac{S}{2} \frac{\partial^2 v_i^j}{\partial t^2} \right] + \frac{\partial^2 u_i^{j+1}}{\partial x^2} = A_i^j \end{cases} \quad (8.24)$$

Kapalı yaklaşımla denklem çifti düzenlendiğinde (8.25) elde edildi.

$$\begin{cases} \left(-\frac{mS}{2k^2} - mP \right) u_i^{j+1} + \left(-\frac{mR}{k} + \frac{mS}{k^2} \right) u_i^j + \left(\frac{mR}{k} - \frac{mS}{2k^2} \right) u_i^{j-1} + \frac{\partial^2 v_i^{j+1}}{\partial x^2} = B_i^j \\ \left(\frac{mS}{2k^2} + mP \right) v_i^{j+1} + \left(\frac{mR}{k} - \frac{mS}{k^2} \right) v_i^j + \left(-\frac{mR}{k} + \frac{mS}{2k^2} \right) v_i^{j-1} + \frac{\partial^2 u_i^{j+1}}{\partial x^2} = A_i^j \end{cases} \quad (8.25)$$

Eşitlik (8.24) de verilen denklem çifti, u ve v fonksiyonlarının ikinci türevlerine yaklaşım yapan (7.2), (7.5) ve (7.6) da elde edilmiş olan kompakt şemalar ile ifade edildi ve zaman boyutunda sonlu farklar metodu kullanılarak kapalı yaklaşımla problemin diskritizasyonu eşitlik (8.27) de görüldüğü gibi tamamlanmış oldu.

u ve v fonksiyonlarının kompakt şemaları oluşturulurken yazılan H_u ve H_v vektörlerinde bilinen sınır değerleri aşağıdaki gibi yerine yazıldı ve böylece S_u ve S_v vektörleri, her zaman adımında hesaplanarak C_u ve C_v katsayı matrislerinin hesaplanması işlemine katılmış oldu.

$$H_u = \begin{bmatrix} k^2 \cos(0) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ k^2 \cos(2\pi) \end{bmatrix} \quad H_v = \begin{bmatrix} k^2 \sin(0) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ k^2 \sin(2\pi) \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} -m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) u_i^{j+1} + (C_v v_i^{j+1} + S_v) = B_i^j - m \left(-\frac{R}{k} + \frac{S}{k^2} \right) u_i^j - m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{2k^2} \right) u_i^{j-1} \\ m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) v_i^{j+1} + (C_u u_i^{j+1} + S_u) = A_i^j - m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) v_i^j - m \left(-\frac{R}{k} + \frac{S}{2k^2} \right) v_i^{j-1} \end{cases} \quad (8.26)$$

$$\begin{cases} -m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) u_i^{j+1} + C_v v_i^{j+1} = B_i^j - S_v(i) + m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) u_i^j - m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{2k^2} \right) u_i^{j-1} \\ m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) v_i^{j+1} + C_u u_i^{j+1} = A_i^j - S_u(i) - m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) v_i^j + m \left(-\frac{R}{k} - \frac{S}{2k^2} \right) v_i^{j-1} \end{cases} \quad (8.27)$$

Eşitlik (8.27) ile verilen diskritizasyon şeması kullanılarak elde edilen ve eşitlik (8.28) de verildiği gibi çözümde kullanılan katsayı matrisi Z aşağıda görülmektedir.

$$Z\psi = F \quad (8.28)$$

Çözüme ait fonksiyonun gerçel ve sanal kısımlarına ait grafikler Şekil 8.3 ve Şekil 8.4 de görülmektedir. Problemin çözümünde kesirli türev mertebesi $\alpha = 0.3$ olarak alındı ve $\alpha = 1$ tamsayılı mertebeden analitik çözüm sonucuyla karşılaştırılarak hata hesabı yapıldı. Bu çözüme ait farklı sayıda nokta ve farklı k değerleri için hata değerleri ise Tablo 8.1 de gösterilmiştir. Tabloda hesaplanan hatalar mutlak hata şeklinde hesaplanırsa da aslında sadece metodun uygunluğunu göstermektedir.

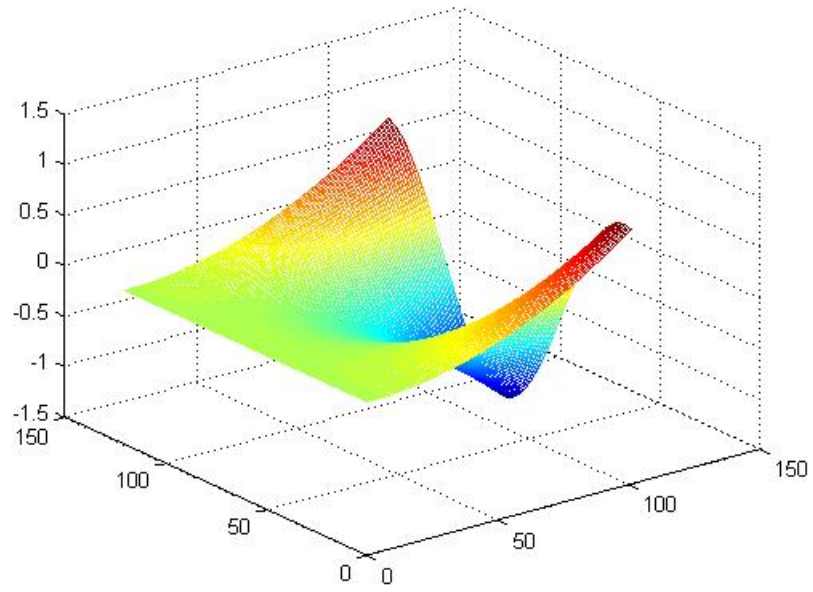
$$Z := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{\text{Cu}} & & & & & 0 & 0 & m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & & & & 0 & 0 & 0 & m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{\text{Cv}} & & & & & 0 \\ 0 & 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & 0 & & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m\left(\frac{S}{2k^2} + P\right) & 0 & 0 & & & & & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Şekil 8.1: Problemin çözümünde eşitliğin solundaki katsayı matrisi (KSF)

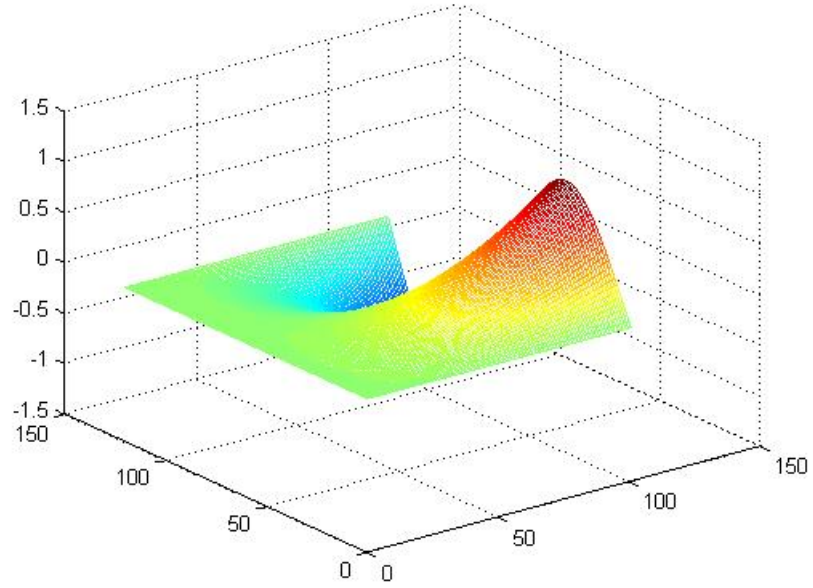
$$F := \begin{bmatrix} 0 & k^2 \cos(0) & (2k)^2 \cos(0) & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & k^2 \cos(2\pi) & (2k)^2 \cos(2\pi) & & & \\ 0 & k^2 \sin(0) & (2k)^2 \sin(0) & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & k^2 \sin(2\pi) & (2k)^2 \sin(2\pi) & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

$\begin{array}{c} \rightarrow t \\ \downarrow x \end{array}$

Şekil 8.2: Problemin çözümünde eşitliğin sağındaki matris (KSF)



Şekil 8.3: Problemin non-homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (KSF)



Şekil 8.4: Problemin non-homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (KSF)

α	k	$N = 21$		$N = 121$		$N = 521$	
		eREAL	eIMAG	eREAL	eIMAG	eREAL	eIMAG
0.3	0.1	0.2714	0.1862	0.2174	0.1464	0.1451	0.1036
	0.01	0.3514	0.2301	0.2988	0.2395	0.2057	0.3178
	0.001	0.3633	0.2536	0.3116	0.2638	0.2156	0.3450
1	0.1	0.4782	0.4018	0.2485	0.3734	0.2450	0.3821
	0.01	0.3735	0.3125	0.0655	0.0529	0.0265	0.0373
	0.001	0.3625	0.3144	0.0635	0.0520	0.0147	0.0116

Tablo 8.1: KSF metodu ile nonhomojen durum için çözüme ait hata değerleri ($\alpha = 1$ gerçek çözüm ile kıyaslandı)

2. DURUM: Problemin Homojen Denklem Olarak Ele Alınması

Problemin Denklem Çifti Haline Getirilmesi:

$$i \frac{\partial^\alpha(u + iv)}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2(u + iv)}{\partial x^2} = 0 \quad (8.29)$$

Eşitlik (8.29) da görüldüğü durum ile ele alınan problem aşağıdaki gibi homojen denklem sistemi haline yeniden düzenlendi.

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \\ -\frac{\partial^\alpha v}{\partial t^\alpha} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \end{cases} \quad (8.30)$$

Caputo Kesirli Türev Tanımının Probleme Uygulanması:

Non-homojen durumda yapılan Caputo kesirli türev uygulaması sonucunda eşitlik (8.24) de elde edilen denklem çifti, homojen durum için eşitlik (8.32) deki gibi yazıldı.

$$\begin{cases} -m \left[P u_i^j + R \frac{\partial u_i^j}{\partial t} + \frac{S}{2} \frac{\partial^2 u_i^j}{\partial t^2} \right] + \frac{\partial^2 v_i^{j+1}}{\partial x^2} = 0 \\ m \left[P v_i^j + R \frac{\partial v_i^j}{\partial t} + \frac{S}{2} \frac{\partial^2 v_i^j}{\partial t^2} \right] + \frac{\partial^2 u_i^{j+1}}{\partial x^2} = 0 \end{cases} \quad (8.31)$$

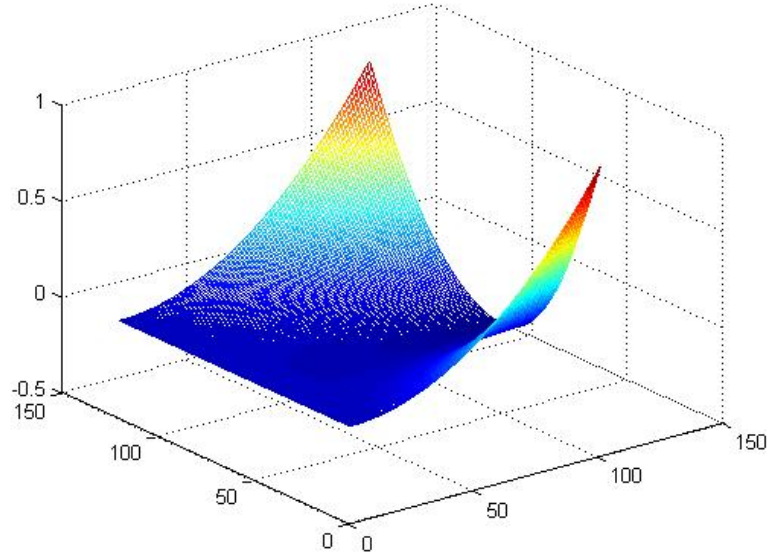
$$\begin{cases} \left(-\frac{mS}{2k^2} - mP \right) u_i^{j+1} + \left(-\frac{mR}{k} + \frac{mS}{k^2} \right) u_i^j + \left(\frac{mR}{k} - \frac{mS}{2k^2} \right) u_i^{j-1} + \frac{\partial^2 v_i^{j+1}}{\partial x^2} = 0 \\ \left(\frac{mS}{2k^2} + mP \right) v_i^{j+1} + \left(\frac{mR}{k} - \frac{mS}{k^2} \right) v_i^j + \left(-\frac{mR}{k} + \frac{mS}{2k^2} \right) v_i^{j-1} + \frac{\partial^2 u_i^{j+1}}{\partial x^2} = 0 \end{cases} \quad (8.32)$$

Denklem çifti, kompakt şemalardan aynı H_u ve H_v vektörleri kullanılarak elde edilen terimlerin yerleştirilmesinden sonra kapalı yaklaşımla yeniden düzenlendi ve eşitlik (8.34) de görülen diskritizasyon şeması elde edildi.

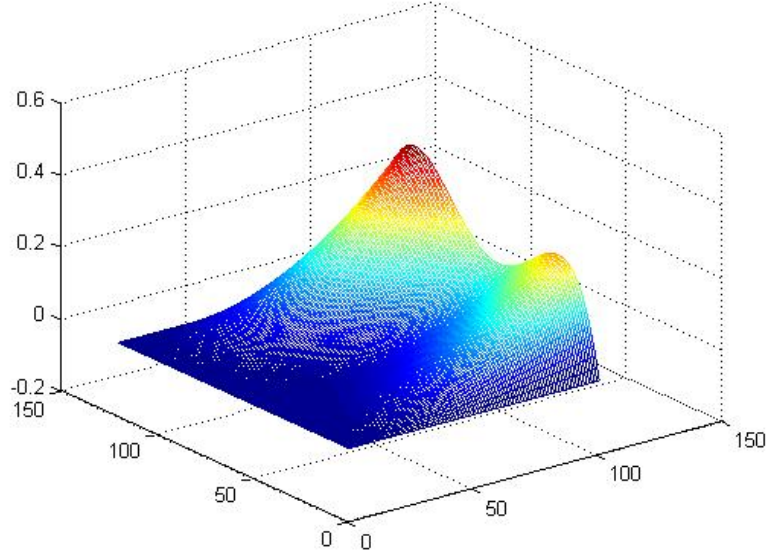
$$\begin{cases} -m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) u_i^{j+1} + (C_v v_i^{j+1} + S_v) = m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) u_i^j + m \left(\frac{S}{2k^2} - \frac{R}{k} \right) u_i^{j-1} \\ m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) v_i^{j+1} + (C_u u_i^{j+1} + S_u) = -m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) v_i^j - m \left(\frac{S}{2k^2} - \frac{R}{k} \right) v_i^{j-1} \end{cases} \quad (8.33)$$

$$\begin{cases} -m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) u_i^{j+1} + C_v v_i^{j+1} = -S_v(i) + m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) u_i^j + m \left(\frac{S}{2k^2} - \frac{R}{k} \right) u_i^{j-1} \\ m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right) v_i^{j+1} + C_u u_i^{j+1} = -S_u(i) - m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) v_i^j - m \left(\frac{S}{2k^2} - \frac{R}{k} \right) v_i^{j-1} \end{cases} \quad (8.34)$$

Şekil 8.1 ve Şekil 8.2 de görülen matrislerin yer aldığı eşitlik (8.28) in çözümüyle sonuca ulaşıldı. Çözümün gerçel ve sanal kısımlarına ait grafikler Şekil 8.5 ve Şekil 8.6 da verilmektedir. Çözümde kesirli türev mertebesi $\alpha = 0.3$ olarak verilmektedir. Ancak eşitlik (8.3) de verilen gerçel çözümü $\alpha = 1$ mertebeden ve denklemin homojen durumu için verilmiştir. Bu sebeple mutlak hata hesapları bu durum için yapılmamıştır.



Şekil 8.5: Problemin homojen durumda $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (KSF)



Şekil 8.6: Problemin non-homojen durumda $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (KSF)

8.2 ORTALAMA VEKTÖR ALANI (OVA) METODU İLE ÇÖZÜMÜ

Eşitlik (8.1) ile verilen lineer homojen olmayan kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden Schrödinger denklemi, bu örnekte de aynı sınır ve başlangıç koşulları ve $\alpha = 0.3$ kesirli türev mertebesi ile ele alındı. Denklem diskrtizasyonundan önce problem, gerçel ve sanal kısımları ayrılarak eşitlik (8.16) da verildiği gibi bir denklem çifti haline getirildi. Daha sonra da denklem çiftinin kesirli mertebeden türev içeren kısımlarına Caputo türev tanımı uygulanarak eşitlik (8.24) deki gibi yazıldı. Ancak zaman boyutuna OVA metodu uygulanacağından ve bu metod da eşitlik (7.89) da görüleceği üzere fonksiyonun zamana göre birinci türevine uygulandığından, eşitlik (8.24) deki denklem çiftinde yer alan fonksiyonun zamana göre ikinci türevini içeren terimler hesaba katılmayarak eşitlik (8.35) deki haliyle kullanıldı. Bu da Caputo türev tanımının uygulanışı sırasında yapılan Taylor seri açılımının ilk iki terimi kullanılarak yaklaşım yapıldığı anlamına gelmektedir. Bu durumda hatanın büyümesi baştan kabul edilmiş oldu.

1. DURUM: Problemin Non-homojen Denklem Olarak Ele Alınması:

$$\begin{cases} -m [Pu + Ru_t] + v_{xx} = B_i^j \\ m [Pv + Rv_t] + u_{xx} = A_i^j \end{cases} \quad (8.35)$$

$$\begin{cases} u_t = \frac{1}{mR} B_i^j + \frac{P}{R} u - \frac{1}{mRh^2} v_{xx} \\ v_t = -\frac{1}{mR} A_i^j + \frac{P}{R} v + \frac{1}{mRh^2} u_{xx} \end{cases} \quad (8.36)$$

Denklem çifti eşitlik (8.36) daki gibi düzenlendikten sonra uzaysal boyutta sonlu farklar metodu, zaman boyutunda da OVA metodu eşitlik (8.37) deki gibi uygulanarak eşitlik (8.38) de verilen diskritizasyon şeması elde edildi. Denklem çiftindeki gerçel kısmı sembolize eden u fonksiyonu için yapılan tüm uygulamalar, denklem çiftindeki sanal kısmı sembolize eden v fonksiyonu için de gerçekleştirildi.

$$\begin{cases} \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = \frac{1}{mR} B_i^j + \frac{P}{R} \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) - \frac{1}{mRh^2} \left[\frac{v_{i-1}^j + v_{i-1}^{j+1}}{2} - 2 \left(\frac{v_i^j + v_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{v_{i+1}^j + v_{i+1}^{j+1}}{2} \right] \\ \frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{k} = -\frac{1}{mR} A_i^j + \frac{P}{R} \left(\frac{v_i^j + v_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{1}{mRh^2} \left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i-1}^{j+1}}{2} - 2 \left(\frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \right) + \frac{u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1}}{2} \right] \end{cases} \quad (8.37)$$

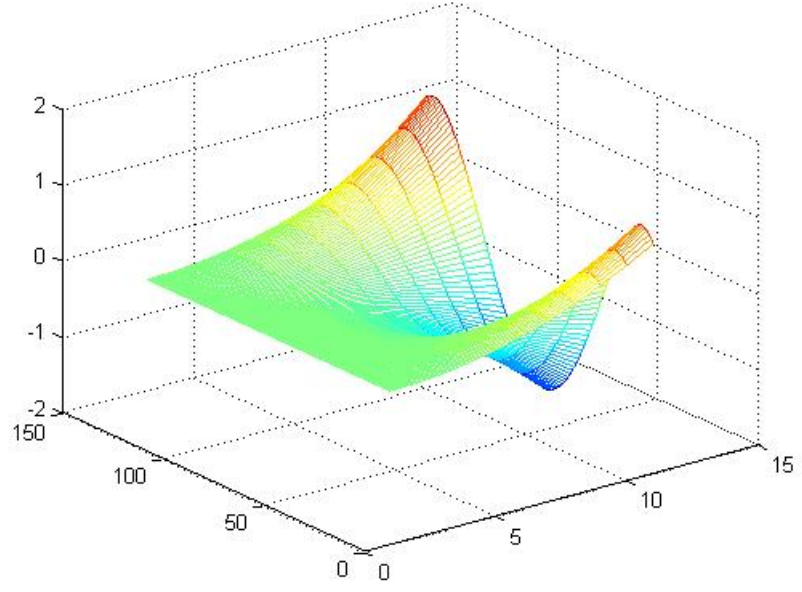
$$\omega := \frac{1}{k} - \frac{P}{2R}, \quad \theta := \frac{1}{k} + \frac{P}{2R} \quad \text{ve} \quad \beta := \frac{1}{2mRh^2}$$

olmak üzere;

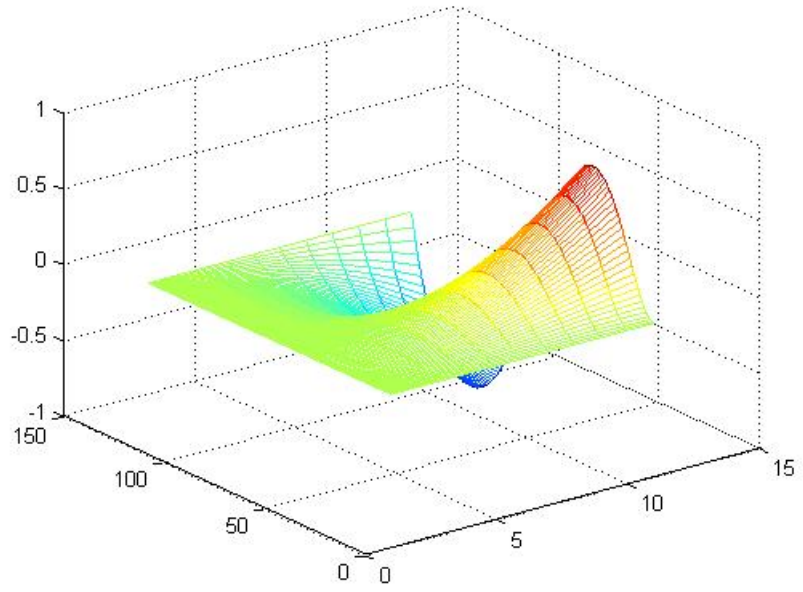
$$\begin{cases} \omega u_i^{j+1} + \beta (v_{i-1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i+1}^{j+1}) = \frac{1}{mR} B_i^j + \theta u_i^j - \beta (v_{i-1}^j - 2v_i^j + v_{i+1}^j) \\ \omega v_i^{j+1} + \beta (u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}) = -\frac{1}{mR} A_i^j + \theta v_i^j + \beta (u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) \end{cases} \quad (8.38)$$

Eşitlik (8.38) ile verilen diskritizasyon şeması kullanılarak elde edilen ve eşitlik (8.39) da verildiği gibi çözümde kullanılan F ve A katsayı matrisi $N = 5$ düğüm noktası için aşağıda görülmektedir.

$$A\psi = F \quad (8.39)$$



Şekil 8.8: Problemin nonhomojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait çözüm grafiği (OVA)



Şekil 8.9: Problemin nonhomojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait çözüm grafiği (OVA)

α	k	$N = 21$		$N = 121$		$N = 521$	
		eREAL	eIMAG	eREAL	eIMAG	eREAL	eIMAG
0.3	0.1	0.8469	0.2233	0.4513	0.4457	0.8551	0.2346
	0.01	1.0806	0.6114	1.1920	0.6696	1.1939	0.6717
	0.001	1.8726	1.2756	2.5738	2.1277	2.6013	2.1516
1	0.1	0.4451	0.4412	0.4513	0.4457	0.4514	0.4457
	0.01	0.3434	0.3434	0.3334	0.3369	0.3235	0.3299
	0.001	0.3343	0.3343	0.3243	0.3200	0.2343	0.2546

Tablo 8.2: OVA metodu ile nonhomojen durum için çözüme ait hata değerleri ($\alpha = 1$ gerçek çözüm ile kıyaslandı)

2. DURUM: Problemin Homojen Denklem Olarak Ele Alınması:

Eşitlik (8.40), homojen denklem çifti olarak aşağıdaki gibi yazıldı ve yeniden düzenlenerek eşitlik (8.42) deki diskritizasyon şeması elde edildi.

$$\begin{cases} -m [Pu + Ru_t] + v_{xx} = 0 \\ m [Pv + Rv_t] + u_{xx} = 0 \end{cases} \quad (8.40)$$

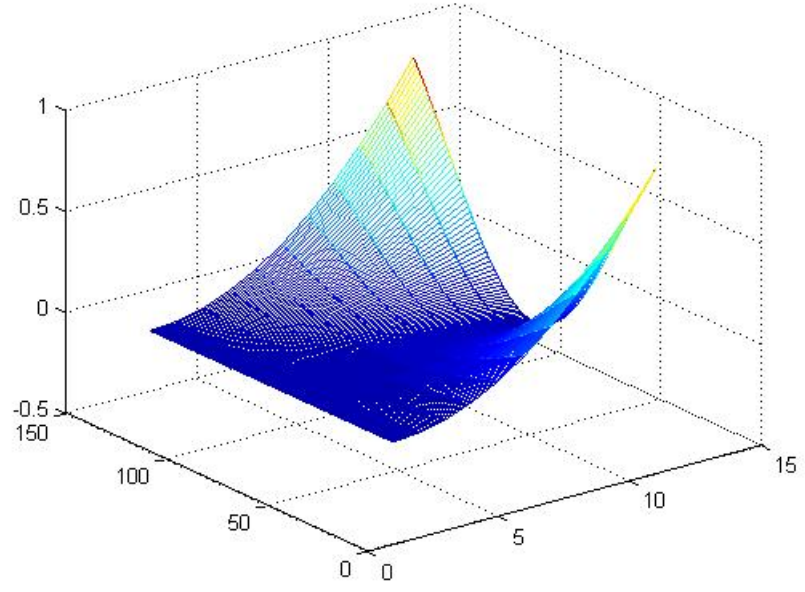
$$\begin{cases} u_t = \frac{P}{R}u - \frac{1}{mRh^2}v_{xx} \\ v_t = \frac{P}{R}v + \frac{1}{mRh^2}u_{xx} \end{cases} \quad (8.41)$$

$$\theta := \frac{1}{k} - \frac{P}{2R}, \quad \text{ve} \quad \beta := \frac{1}{2mRh^2}$$

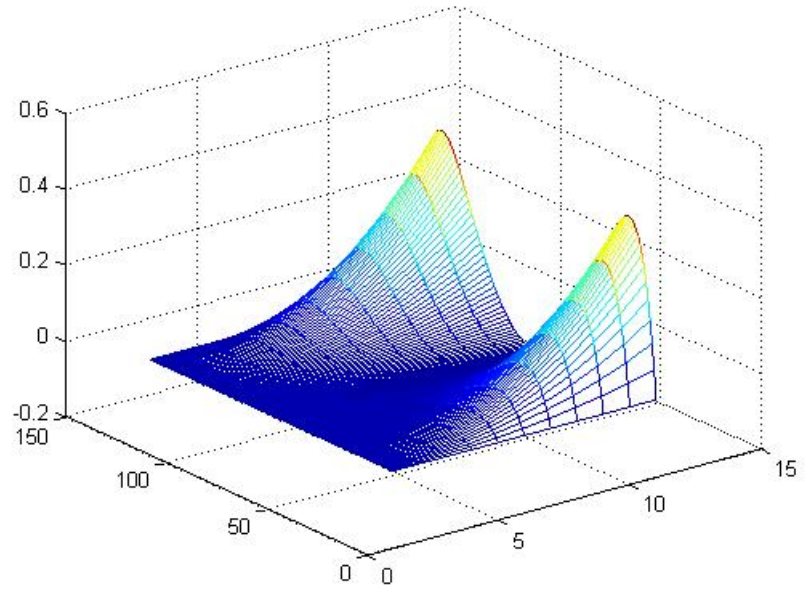
kısa gösterimleriyle

$$\begin{cases} \theta u_i^{j+1} + \beta (v_{i-1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i+1}^{j+1}) = \theta u_i^j - \beta (v_{i-1}^j - 2v_i^j + v_{i+1}^j) \\ \theta v_i^{j+1} + \beta (u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}) = \theta v_i^j + \beta (u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j) \end{cases} \quad (8.42)$$

Problemin homojen durumda $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel ve sanal kısımlarına ait OVA metodu ile çözüm grafikleri Şekil 8.10 ve Şekil 8.11 de görülmektedir.



Şekil 8.10: Homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun gerçel kısmına ait OVA metodu ile çözüm grafiği



Şekil 8.11: Homojen durum, $N=121$ nokta ve $k=0.01$ için fonksiyonun sanal kısmına ait OVA metodu ile çözüm grafiği

BÖLÜM 9

SAYISAL DAĞILIM BAĞINTILARI VE SONUÇLAR

Bu bölümde, 8. Bölümde KSF ve OVA metodlarıyla, homojen ve homojen olmayan durumlar için çözümleri verilen, kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden lineer Schrödinger denklemi ile ifade edilen sınır değer problemine, bu metodların uygulanmasıyla elde edilen diskritizasyon şemalarının tutarlı ve yakınsak olduğunu göstermek için yapılan sayısal dağılım analizleri verilmektedir.

9.1 DAĞILIM ANALİZİ

Sayısal dağılım analizi, sürekli ve kesikli formdaki dağılım denklemlerinin karşılaştırılmasıyla yapılmaktadır. Sürekli dağılım denklemi elde edilirken eşitlik (9.1) de verilen lineer kısmi diferansiyel denklemlerin her dalga için genel çözümü, problem olarak ele alınan denklemde yerine yazılır. k ve ω sırasıyla dalga numarası ve açısal frekansı temsil etmektedir.

$$v = e^{i(kx+\omega t)} \quad (9.1)$$

Kesikli dağılım denklemini ise eşitlik (9.3) deki genel çözümünün kesikli ifadesinin, çözümün kesikli olarak ifade edildiği diskritizasyon şemasında yerine yazılması ile elde edilir. Burada kesikli çözümde dalga genliğini ifade eden $\hat{v} = 1$ değeri ile kullanılabilir.

$$v = \hat{v}e^{i(mk\Delta x+n\omega\Delta t)}, \quad i = \sqrt{-1} \quad (9.2)$$

$$\bar{k} := k\Delta x$$

$$\bar{\omega} := \omega\Delta t$$

kısa gösterimleri ile eşitlik (9.2) aşağıdaki gibi yazılır.

$$v = e^{i(m\bar{k}+n\bar{\omega})} \quad (9.3)$$

Dağılım analizinde, sürekli ve kesikli çözümlerdeki dalga sayısına bağlı olarak dalga hızları karşılaştırıldığından bu çözümlerin ifade ettiği dalgaların diğer özellikleri analiz için önemli değildir. Bu sebeple, dalga genliğini ifade eden $\hat{\psi} = 1$ alınabildiği gibi, non-homojen denklemlerin özel çözümleri de analiz için kullanılmaz, denklemin sağ tarafı 0 alınarak sürekli ve kesikli genel çözümler ile işlemler gerçekleştirilir.

9.2 KISMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNE UYGULANAN KSF METODU İÇİN DAĞILIM ANALİZİ

Sürekli Dağılım Bağıntısının Eldesi:

Eşitlik (9.1) in x e göre birinci ve ikinci türevleri eşitlik (8.31) de yerine yazıldı. $\alpha := e^{i(kx+\omega t)}$ kısa gösterimi kullanılarak, benzer işlemler sanal kısım için de gerçekleştirildi.

$$v = e^{i(kx+\omega t)}, \quad v = \alpha \quad (9.4)$$

$$v_t = i\omega e^{i(kx+\omega t)}, \quad v_t = i\omega\alpha \quad (9.5)$$

$$v_{tt} = -\omega^2 e^{i(kx+\omega t)}, \quad v_{tt} = -\omega^2\alpha \quad (9.6)$$

$$v_x = ike^{i(kx+\omega t)}, \quad v_x = ik\alpha \quad (9.7)$$

$$v_{xx} = -k^2 e^{i(kx+\omega t)}, \quad v_{xx} = -k^2 \alpha \quad (9.8)$$

Eşitlik (8.31) ile verilen denklem çiftindeki ikinci denklemden elde edilen u_{xx} fonksiyonunun iki kez ardarda integrali alınarak u fonksiyonu elde edildi ve işlemlerde kullanmak üzere t ye göre birinci ve ikinci türevleri alındı.

$$u_{xx} = -mPv - mRv_t - m\frac{S}{2}v_{tt} \quad (9.9)$$

$$u_x = \int (u_{xx}) dx = \int -m \left(P\alpha - R\omega i\alpha - \frac{S}{2}\omega^2\alpha \right) dx \quad (9.10)$$

$$u_x = \frac{mPi}{k}\alpha - \frac{mR\omega}{k}\alpha - \frac{mS\omega^2 i}{2k}\alpha \quad (9.11)$$

$$u = \int (u_x) dx = \frac{mP}{k^2}\alpha + \frac{mR\omega i}{k^2}\alpha - \frac{mS\omega^2}{2k^2}\alpha \quad (9.12)$$

$$u_t = \frac{mPi\omega}{k^2}\alpha - \frac{mR\omega^2}{k^2}\alpha - \frac{mS\omega^3 i}{2k^2}\alpha \quad (9.13)$$

$$u_{tt} = -\frac{mP\omega^2}{k^2}\alpha - \frac{mR\omega^3 i}{k^2}\alpha + \frac{mS\omega^4}{2k^2}\alpha \quad (9.14)$$

(9.8), (9.12), (9.13) ve (9.14) ile gösterilen denklemler eşitlik (8.31) ile gösterilen denklem çiftindeki birinci denklemde yerlerine yazılarak gerekli düzenlemeler yapıldı ve eşitlik (9.15) elde edildi.

$$-\frac{S^2}{4}\omega^4 + \left[\frac{S(2R+1)}{2} \right] i\omega^3 + \left[\frac{S(1+P)}{2} + R \right] \omega^2 - P(1+R) i\omega PR = \frac{k^4}{m^2} \quad (9.15)$$

$$d_1 := \frac{S^2}{4}, \quad d_2 := \frac{S(2R+1)}{2}, \quad d_3 := \frac{S(1+P)}{2} + R, \quad d_4 := P(1+R), \quad d_5 := PR$$

ve

$$b_1 := (12d_1d_5 - 3d_1d_4 + d_3^3) m^2 + 12d_1k^4 \quad (9.16)$$

$$b_2 := (d_3^2 - 3d_2d_4) m^4 + 12d_1 (k^4 + d_5m^2) m^2 \quad (9.17)$$

$$b_3 := (-2d_3^3 + 9d_2d_3d_4 - 27d_1d_4^2) m^6 + [(k^4 + d_5m^2) (72d_1d_3 - 27d_2^2)] m^4 \quad (9.18)$$

kısa gösterimleri ile eşitlik (9.15) eşitlik (9.19) daki gibi yeniden yazıldı.

$$-d_1\omega^4 + d_2i\omega^3 + d_3\omega^2 - d_4i\omega - d_5 = \frac{k^4}{m^2} \quad (9.19)$$

Eşitlik (9.19) un köklerinden biri olan sürekli dağılım denklemi (9.20), aşağıda belirtilen kısa gösterimlerle elde edilmiş oldu.

$$\omega = \frac{d_2i}{4d_1} - \frac{1}{2} \sqrt{L_1 + \frac{L_4}{3d_1L_3}} + L_3L_5 - \frac{1}{2} \sqrt{L_2 - \frac{L_4}{3d_1L_3}} - \frac{L_6}{4\sqrt{L_1 + \frac{L_4}{3d_1L_3}}} \quad (9.20)$$

$$L_1 := -\frac{d_2^2}{4d_1^2} + \frac{2d_3}{3d_1}$$

$$L_2 := -\frac{d_2^2}{2d_1} + \frac{4d_3}{3d_1}$$

$$L_3 := (b_2 + \sqrt{-4b_3^3 + b_2^2})^{1/3}$$

$$L_4 := 2^{1/3}b_1$$

$$L_5 := \frac{1}{32^{1/3}d_1m^2}$$

$$L_6 := -\frac{d_2^3i}{d_1^3} + \frac{4d_2d_3i}{3d_1^2} - \frac{8d_4i}{d_1}$$

Kesikli Dağılım Bağıntısının Eldesi:

Eşitlik (9.3) ün gerçel ve sanal kısımlar için eşitlik (8.34) de yerine yazılması ile ilgili işlem basakları aşağıda görülmektedir. Bu işlemler sırasında kompakt şemadaki C_u ve C_v matrislerinin yerine normları kullanıldı.

$$a := m \left(\frac{S}{2k^2} + P \right), \quad b := m \left(\frac{R}{k} - \frac{S}{k^2} \right) \quad \text{ve} \quad c := m \left(\frac{S}{2k^2} - \frac{R}{k} \right)$$

olmak üzere diskritizasyon şeması eşitlik (9.21) de görüldüğü gibi yeniden düzenlendi.

$$\begin{cases} -a_1u_i^{j+1} + \|C_v\| v_i^{j+1} + \|S_v\| - b_1u_i^j + c_1u_i^{j-1} = 0 \\ a_1v_i^{j+1} + \|C_u\| u_i^{j+1} + \|S_u\| + b_1v_i^j - c_1v_i^{j-1} = 0 \end{cases} \quad (9.21)$$

Eşitlik (9.21) deki ikinci denklemden u_i^{j+1} içeren terim çekilerek j yerine $j-1$ ve $j-2$ yazılarak yeniden düzenlendi.

$$\|C_u\| u_i^{j+1} = -a_1 v_i^{j+1} - \|S_u^j\| - b_1 v_i^j + c_1 v_i^{j-1} \quad (9.22)$$

$$\|C_u\| u_i^j = -a_2 v_i^j - \|S_u^{j-1}\| - b_2 v_i^{j-1} + c_2 v_i^{j-2} \quad (9.23)$$

$$\|C_u\| u_i^{j-1} = -a_3 v_i^{j-1} - \|S_u^{j-2}\| - b_3 v_i^{j-2} + c_3 v_i^{j-3} \quad (9.24)$$

(9.22), (9.23) ve (9.24) eşitlikleri (9.21) deki denklem çiftinin birinci denkleminde yerine yazıldı.

$$-a_1 u_i^{j+1} - b_1 u_i^j + c_1 u_i^{j-1} = -\|C_v\| v_i^{j+1} - \|S_v^j\| \quad (9.25)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & -a_1 \frac{1}{\|C_u\|} \left[-a_1 v_i^{j+1} - b_1 v_i^j + c_1 v_i^{j-1} - \|S_u^j\| \right] - \\ & -b_1 \frac{1}{\|C_u\|} \left[-a_2 v_i^j - b_2 v_i^{j-1} + c_2 v_i^{j-2} - \|S_u^{j-1}\| \right] + \\ & +c_1 \frac{1}{\|C_u\|} \left[-a_3 v_i^{j-1} - b_3 v_i^{j-2} + c_3 v_i^{j-3} - \|S_u^{j-2}\| \right] = -\|C_v\| v_i^{j+1} - \|S_v^j\| \end{aligned}$$

Aşağıda belirtilen kısa gösterimlerle eşitlik (9.25), eşitlik (9.26) daki şekilde yazıldı.

$$\begin{aligned} \frac{a_1^2}{\|C_u\|} &:= \alpha_1 & \frac{a_1 b_1}{\|C_u\|} &:= \alpha_2 & \frac{a_1 c_1}{\|C_u\|} &:= \alpha_3 & \frac{a_1}{\|C_u\|} &:= \alpha_4 \\ \frac{b_1 a_2}{\|C_u\|} &:= \beta_1 & \frac{b_1 b_2}{\|C_u\|} &:= \beta_2 & \frac{b_1 c_2}{\|C_u\|} &:= \beta_3 & \frac{b_1}{\|C_u\|} &:= \beta_4 \\ \frac{c_1 a_3}{\|C_u\|} &:= \gamma_1 & \frac{c_1 b_3}{\|C_u\|} &:= \gamma_2 & \frac{c_1 c_3}{\|C_u\|} &:= \gamma_3 & \frac{c_1}{\|C_u\|} &:= \gamma_4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \alpha_1 v_i^{j+1} + \alpha_2 v_i^j - \alpha_3 v_i^{j-1} + \alpha_4 \|S_u^j\| + \\ & + \beta_1 v_i^j + \beta_2 v_i^{j-1} - \beta_3 v_i^{j-2} + \beta_4 \|S_u^{j-1}\| - \\ & - \gamma_1 v_i^{j-1} - \gamma_2 v_i^{j-2} + \gamma_3 v_i^{j-3} - \gamma_4 \|S_u^{j-1}\| = -\|C_v\| v_i^{j+1} - \|S_v^j\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\alpha_1 + \|C_v\|) v_i^{j+1} + (\alpha_2 + \beta_1) v_i^j + (-\alpha_3 + \beta_2 - \gamma_1) v_i^{j-1} + (-\beta_3 - \gamma_2) v_i^{j-2} + \gamma_3 v_i^{j-3} = \\
= -\|S_v^j\| + \alpha_4 \|S_u^j\| - \beta_4 \|S_u^{j-1}\| + \gamma_4 \|S_u^{j-2}\|
\end{aligned} \tag{9.26}$$

$$T := -\|S_v^j\| + \alpha_4 \|S_u^j\| - \beta_4 \|S_u^{j-1}\| + \gamma_4 \|S_u^{j-2}\| \tag{9.27}$$

$$\begin{aligned}
\xi_1 := \alpha_1 + \|C_v\| \quad \xi_2 := \alpha_2 + \beta_1 \quad \xi_3 := -\alpha_3 + \beta_2 - \gamma_1 \\
\xi_4 := -\beta_3 - \gamma_2 \quad \xi_5 := \gamma_3
\end{aligned}$$

i ve j indisleri sırasıyla m ve n indisleri ile değiştirildi ve eşitlik (9.28) elde edildi.

$$\xi_1 v_m^{n+1} + \xi_2 v_m^n + \xi_3 v_m^{n-1} + \xi_4 v_m^{n-2} + \xi_5 v_m^{n-3} = T \tag{9.28}$$

Son olarak eşitlik (9.3), eşitlik (9.28) de yerine yazıldı.

$$e^{im\bar{k}} e^{in\bar{\omega}} (\xi_1 e^{i\bar{\omega}} + \xi_2 + \xi_3 e^{-i\bar{\omega}} + \xi_4 e^{-2i\bar{\omega}} + \xi_5 e^{-3i\bar{\omega}}) = T \tag{9.29}$$

Eşitlik (9.29) daki $e^{im\bar{k}}$ ve $e^{in\bar{\omega}}$ terimleri için bu terimlerin, $\bar{\omega} = 0$ ve $\bar{k} = 0$ noktaları civarında, sırasıyla $O(\bar{\omega}^2)$ ve $O(\bar{k}^2)$ doğruluk mertebesindeki seri açılımları kullanıldı. Eşitlik (9.32) çözüldüğünde köklerinden biri kesikli dağılım denklemini verecek denklem olarak elde edildi.

$$E := \xi_1 - \xi_3 - 2\xi_4 - 3\xi_5 \tag{9.30}$$

$$G := \xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + \xi_4 + \xi_5 \tag{9.31}$$

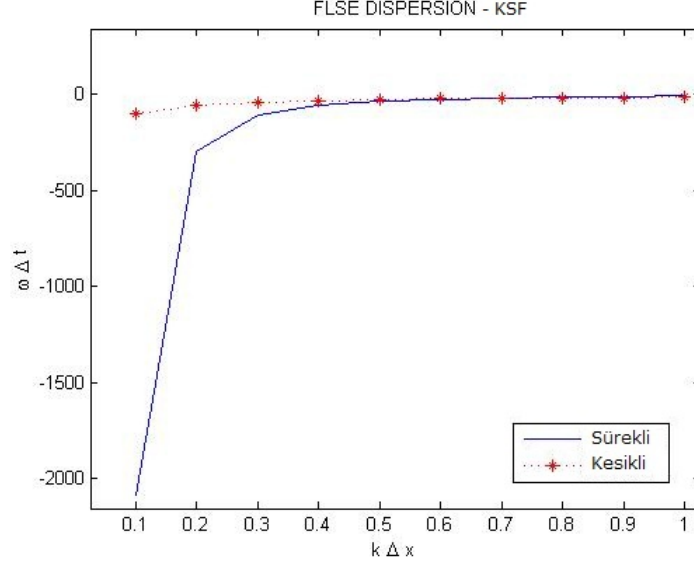
olmak üzere

$$nE\bar{\omega}^2 + (E + nG) i\bar{\omega} + G = \frac{T}{1 + im\bar{k}} \tag{9.32}$$

Eşitlik (9.32) $nE(m\bar{k} - i) \neq 0$ koşulu altında ω için çözüldüğünde elde edilen köklerden biri eşitlik (9.33) de verilen kesikli dağılım denklemdir.

$$\omega = \frac{\theta_2(k\Delta xm - i) - \sqrt{-4\theta_1(1 + ik\Delta xm)[\theta_3(1 + ik\Delta xm) - 1] + \theta_2^2(i - k\Delta xm)^2}}{2\theta_1(1 + ik\Delta xm)\Delta t} \tag{9.33}$$

$$\theta_1 := \frac{nE}{T} \quad \theta_2 := \frac{E+nG}{T} \quad \theta_3 := \frac{G}{T}$$



Şekil 9.1: Probleme uygulanan KSF metodunun dağılım analizi için eşitlik (9.20) ve (9.33) ün karşılaştırılması

Ele alınan probleme uygulanan metod sonucunda elde edilen çözümün tutarlı ve yakınsak olması sürekli ve kesikli dağılım eğrilerinin en az bir noktada kesişmesi gerekir. Şekil 9.1 de görüldüğü gibi uygulanan KSF metodu ve elde edilen çözüm tutarlı ve yakınsaktır.

9.3 KISMİ TÜREVLİ ZAMAN-KESİRLİ MERTEBEDEN SCHRÖDİNGER DENKLEMİNE UYGULANAN OVA METODU İÇİN DAĞILIM ANALİZİ

Sürekli Dağılım Bağıntısının Eldesi:

Eşitlik (8.41) ile verilen denklem çiftindeki ikinci denklemden elde edilen u_{xx} fonksiyonunun iki kez ardarda integrali alınarak u fonksiyonu elde edildi ve işlemlerde kullanmak üzere t ye göre birinci ve ikinci türevleri aşağıda görüldüğü gibi alındı.

$$u_{xx} = -mPv - mRv_t \quad (9.34)$$

$$u_x = \int (u_{xx}) dx = \int (-mP\alpha - mR\omega i\alpha) dx \quad (9.35)$$

$$u_x = \frac{mPi}{k}\alpha - \frac{mR\omega}{k}\alpha \quad (9.36)$$

$$u = \int (u_x) dx = \frac{mP}{k^2}\alpha + \frac{mR\omega i}{k^2}\alpha \quad (9.37)$$

$$u_t = \frac{mPi\omega}{k^2}\alpha - \frac{mR\omega^2}{k^2}\alpha \quad (9.38)$$

(9.8), (9.37) ve (9.38) ile gösterilen denklemler eşitlik (8.41) ile verilen denklem çiftindeki birinci denklemde yerlerine yazılarak gerekli düzenlemeler yapıldı ve eşitlik (9.39) elde edildi.

$$-m^2R^2i\omega^2 - m^2PR(1-i)\omega - m^2P^2 - k^4 = 0 \quad (9.39)$$

Eşitlik (9.39) ω için çözüldüğünde elde edilen köklerden biri, eşitlik (9.40) da verilen sürekli dağılım denklemidir.

$$\omega = -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}P [1 \pm \sqrt{1 + k^4}] \quad (9.40)$$

Kesikli Dağılım Bağıntısının Eldesi:

Eşitlik (9.3) ün sanal kısımlar için eşitlik (9.37) de yerine yazılması ile ilgili işlem basamakları aşağıda görülmektedir. Bunun için eşitlik (9.37) deki denklem çiftinin ilkinden $u_i^{j+1} + u_i^j$ ikincisinden $v_i^{j+1} - v_i^j$ çekildi.

$$u_i^{j+1} + u_i^j = -\frac{\beta}{\theta} [(v_{i-1}^{j+1} + v_{i-1}^j) - 2(v_i^{j+1} + v_i^j) + (v_{i+1}^{j+1} + v_{i+1}^j)] \quad (9.41)$$

$$v_i^{j+1} - v_i^j = \frac{\beta}{\theta} [(u_{i-1}^{j+1} + u_{i-1}^j) - 2(u_i^{j+1} + u_i^j) + (u_{i+1}^{j+1} + u_{i+1}^j)] \quad (9.42)$$

Eşitlik (9.41) de sırasıyla i yerine $i - 1$ ve $i + 1$ yazılarak, eşitlik (9.41), (9.43) ve (9.44), eşitlik (9.42) de yerlerine yazıldı.

$$u_{i-1}^{j+1} + u_{i-1}^j = -\frac{\beta}{\theta} [(v_{i-2}^{j+1} + v_{i-2}^j) - 2(v_{i-1}^{j+1} + v_{i-1}^j) + (v_i^{j+1} + v_i^j)] \quad (9.43)$$

$$u_{i+1}^{j+1} + u_{i+1}^j = -\frac{\beta}{\theta} [(v_i^{j+1} + v_i^j) - 2(v_{i+1}^{j+1} + v_{i+1}^j) + (v_{i+2}^{j+1} + v_{i+2}^j)] \quad (9.44)$$

$$\begin{aligned} v_i^{j+1} - v_i^j = \frac{\beta}{\theta} \left\{ -\frac{\beta}{\theta} [(v_{i-2}^{j+1} + v_{i-2}^j) - 2(v_{i-1}^{j+1} + v_{i-1}^j) + (v_i^{j+1} + v_i^j)] \right. \\ \left. - 2\frac{\beta}{\theta} [(v_{i-1}^{j+1} + v_{i-1}^j) - 2(v_i^{j+1} + v_i^j) + (v_{i+1}^{j+1} + v_{i+1}^j)] \right. \\ \left. - \frac{\beta}{\theta} [(v_i^{j+1} + v_i^j) - 2(v_{i+1}^{j+1} + v_{i+1}^j) + (v_{i+2}^{j+1} + v_{i+2}^j)] \right\} \quad (9.45) \end{aligned}$$

Eşitlik (9.45) düzenlenerek ve i ve j indisleri sırasıyla m ve n indisleri ile değiştirilerek eşitlik (9.46) elde edildi.

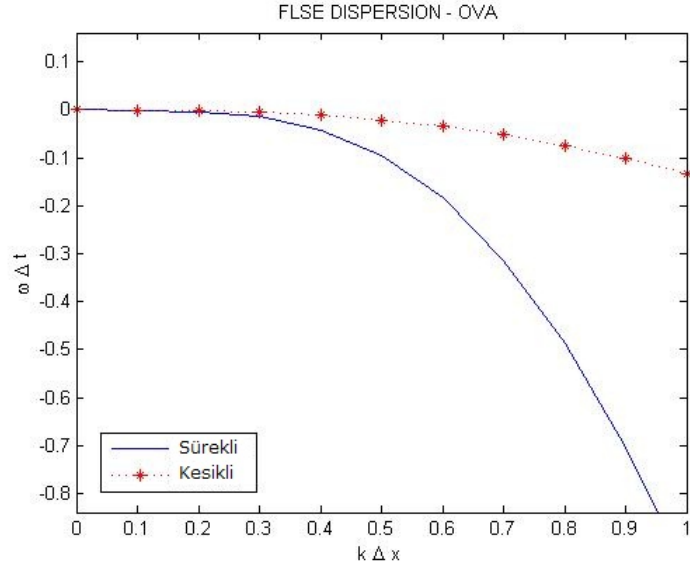
$$\begin{aligned} v_i^{j+1} - v_i^j = -\frac{\beta^2}{\theta^2} [(v_{m-2}^{n+1} + v_{m-2}^n) - 4(v_{m-1}^{n+1} + v_{m-1}^n) \\ + 2(v_m^{n+1} + v_m^n) - 4(v_{m+1}^{n+1} + v_{m+1}^n) + (v_{m+2}^{n+1} + v_{m+2}^n)] \quad (9.46) \end{aligned}$$

Son olarak eşitlik (9.3) eşitlik (9.46) da yerine yazılarak düzenlendiğinde eşitlik (9.47) elde edildi.

$$(e^{i\bar{\omega}} - 1) = -\frac{\beta}{\theta}(e^{i\bar{\omega}} + 1) [e^{i2\bar{k}} + e^{-i2\bar{k}} - 4(e^{i\bar{k}} + e^{-i\bar{k}}) + 2] \quad (9.47)$$

Bu denklem, $e^{i2\bar{k}} + e^{-i2\bar{k}} = \cos(2\bar{k})$, $e^{i\bar{k}} + e^{-i\bar{k}} = \cos(\bar{k})$ ve $\frac{e^{i\bar{\omega}}-1}{e^{i\bar{\omega}}+1} = i \tan(\frac{\bar{\omega}}{2})$ dönüşümleri kullanılarak yeniden düzenlendiğinde eşitlik (9.48) deki kesikli dağılım denklemi elde edildi.

$$\omega = \frac{2}{\Delta t} \arctan \left[\frac{i\beta^2}{\theta^2} (\cos(2k\Delta x) - \cos(k\Delta x) + 2) \right] \quad (9.48)$$



Şekil 9.2: Probleme uygulanan OVA metodunun dağılım analizi için eşitlik (9.40) ve (9.48) in karşılaştırılması

Ele alınan probleme uygulanan metod sonucunda elde edilen çözümün tutarlı ve yakınsak olması için sürekli ve kesikli dağılım eğrilerinin en az bir noktada kesişmesi gerekir. Şekil 9.2 de görüldüğü gibi uygulanan OVA metodu ve elde edilen çözüm tutarlı ve yakınsaktır.

BÖLÜM 10

SONUÇ

Bu tez çalışmasında, KSF ve orta nokta metoduna dönüşen OVA metodları kullanılarak kısmi türevli zaman-kesirli mertebeden lineer Schrödinger denklemi ile ifade edilen bir problemin çözümü gerçekleştirilmiştir. Ele alınan Schrödinger denkleminin zaman-kesirli mertebeden türev içeren terimleri Caputo kesirli türev tanımı uygulanarak, fonksiyonun kendisi ve tamsayılı mertebeden türevlerinin kombinasyonu şeklinde ifade edildikten sonra sözü edilen metodlarla çözümler gerçekleştirilmiştir. Tablolardaki hata değerlerinin sebeplerinin; Caputo türev tanımı uygulanırken Taylor seri açılımında belirli sayıda terim kullanılması, OVA metodu uygulanırken metodun tanımından dolayı u_{tt} içeren terimin kullanılmaması ve probleme ait sınır değerlerinin zamana bağlı ve üstel olması ile ilişkili olduğu değerlendirilmektedir. Ayrıca verilen tablolardaki hata değerleri gerçekte daha küçüktür çünkü bu değerler kesirli mertebeden diferansiyel denklemlerin çözümlerinin tamsayılı mertebeden gerçek çözümleri ile karşılaştırılmasıyla elde edilmiştir.

Gerçekleştirilen çözüm ile ilgili dağılım analizi de yapılmıştır. Uygulanan metod ile elde edilen çözümün tutarlı ve yakınsak olması için dağılım analizinde elde edilen sürekli ve kesikli dağılım eğrilerinin en az bir noktada kesişmesi gerekir. Sonuç olarak, ele alınan Schrödinger denkleminin KSF ve OVA metodları ile sayısal çözümlerinin tutarlı ve yakınsak olduğu görülmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Asghar, N., Ali, K., Yıldırım, A., Mohyud-din, S.T., Homotopy Analysis Method for Time-Fractional Schödinger Equations, *Walailak Journal of Science and Technology*, Vol:9, Issue:4, 395-405, 2012.
- [2] Abarbanel, S and Kumar, A., Compact High-Order Schemes for the Euler Equations, *Journal of Scientific Computing*, V:3, p:275-288, 1988.
- [3] Adda, F. B., Cresson, J., Fractional Differential Equations and the Schödinger Equation, *Applied Mathematics and Computation*, Vol.161, Issue:1, 232-245, 2005.
- [4] Ahmed, Bouthina, S., Monaquel, S.I., Multigrid Method for Solving 2D-Poisson Equation with Sixth Order Difference Method, *International Mathematical Forum*, Vol:6, No:55, p:2729-2736, 2011.
- [5] Akkoyunlu, C., Lineer Olmayan Schrödinger Denkleminin Enerji Korunmalı Yöntemle Çözümü ve Model İndirgeme Yönteminin Uygulanması, *Doktora Tezi* , İstanbul Kültür Üniversitesi, 2013.
- [6] Amore, A., Fernández, F. M., Hofmann, C.P., Sáenz, R. A., Collocation Method for Fractional Quantum Mechanics, *Journal of Mathematical Physics*, Vol:51, Issue:12, Article ID:122101, 11 sayfa, 2010.
- [7] Arfken, G. B., Weber, H. J., Mathematical Methods for Pyhsicist, *Academic Press*, Waltham, 1995.
- [8] Ashyralyev, A., A Note on fractional derrivatives and Fractional Power Operators, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol:357, Issue:1, 232-236, 2009.
- [9] Ashyralyev, A., Sırma, A., A Note on the Numerical Solution of the Semi-linear Schödinger Equation, *Nonlinear Analysis: Theory, Methods Applications*, Vol:71, Issue:12, e2507-e2516, 2009.

- [10] Ashyralyev, A., Dal, F., Pınar, Z., A Note on the Fractional Hyperbolic Differential and Difference Equations, *Applied Mathematics and Computation*, Vol:217, Issue:9, 4654-4664, 2011.
- [11] Ashyralyev, A., Hiçdurmaz, B., On the Numerical Solution of Fractional Schödinger Differential Equations With The Dirichlet Condition, *International Journal of Computer Mathematics*, Vol: 89, Issue:13-14, 1927-1936, 2012.
- [12] Baker, G. A. Jr., Graves Morris, P., Pade Approximants, *Cambridge University Press*, NewYork, 1996.
- [13] Balenau, D., Golmankhaneh, Alireza K., Golmankhaneh Ali K. Golmankhaneh, Solving of the Fractional Nonlinear and Linear Schödinger Equations by Homotpy Perturbation Method, *Romanian Journal of Physics*, Vol:54, 823-832, 2009.
- [14] Bayın, S., Fen ve Mühendislik Bilimlerinde Matematik Yöntemler, *METU Press*, Ankara, 2000.
- [15] Bolch, S.C., Classical and Harmonic Oscillators, *John Wiley Sons*, New York, 1997.
- [16] Berezin, F.A., Shubim, M. A., The Schrödinger Equation, *Kluwer Academic Publishers*, Netherlands, 1991.
- [17] Boersma, B.J., A 6th Order Staggered Compact Finite Difference Method for the Incompressible Navier-Stokes and Scalar Transport Equations, *Journal of Computational Physics*, V:230, p:4940-4954, 2011.
- [18] Caputo, M., Linear Models of Dissipation Whose Q is Almost Frequency Independent, *Anna, di Geofis.*,1966, 19 3-393.
- [19] Caputo, M., Linear Models of Dissipation Whose Q is Almost Frequency Independent Part II, *Geophys., J. Roy. Astron. Soc.*, 13(1967) , 529-539.
- [20] Caputo, M., Elasticita e Dissipazione, *Zanichelli*, Bologna, 1969.

- [21] Cellodoni, E., McLachlan, R.I., McLachlan, D.I., Owren, B., Quispel, G.r.W., Wright, W., Energy Preserving Runge-Kutta Methods, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43, 645-649, 2009.
- [22] Cellodoni, E., Grimm, V., McLachlan, D.I., O'Neale, D.R.J., Quispel, G.R.W., Preserving Energy Resp. Dissipation in Numerical PDEs, Using the Average Vector Field Method, *Journal of Computational Physics*, 6770-6789, 2009.
- [23] Cellodoni, E., McLachlan, D.I., Owren, B., Quispel, G.R.W, Structor of B-series for Some Classes of Geometric Integrators, *Found. Comput. Math.*, Vol:10, 673693, 2010.
- [24] Cieslinski, J.L., Improving the Accuracy of the AVF Method, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 259, 233-243, 2014.
- [25] Chartier, P., Faou, E., Murua, Tan Algebraic Approach to Invariant Preserving Integrators: The Case of Quadratic and Hamiltonian Invariants, *Numer. Math.*, 103, 575-590, 2006.
- [26] Cohen, D., Hairer, E., Lineer EnergyPreserving Integrators for Poisson Systems , *BIT*, 51, 91-101, 2011.
- [27] Collatz, L., The Numerical treatment of Differential Equations, *Springer-Verlag*, NewYork, 1961.
- [28] Courant, R., Friedrich, K., Lewy, H., On the Partial Differential Equations of Mathematical Physics, *IBM J.*, Vol:11, 215-234, 1967.
- [29] Dahlby, M., Owren, B., G., A General Framework for Deriving Integral Preserving Numerical Methods for PDEs, *SIAM, Journal Sci. Comput.*, 33, 2318-2340, 2010.
- [30] Dal, F., Application of Variational Iteration method to Fractional Hyperbolic Partial differential Equations, *Mathematical Problems in Engineering*, Article ID:824385,1-10, 2009.

- [31] Das, S., Functional Fractional Calculus, *Springer*, Berlin 2011.
- [32] Distefano, J. J., Stubberud, A. R., Williams, I. J., Schumss Outline of Theory and Problems of Feedback and Control Systems, *Mc Graw-Hill*, 1995.
- [33] Dong, J., Xu, M., Space-Time Fractional Schödinger Equation With the Time-Independent Potentials, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Vol:344, Issue:2, 1005-1017, 2008.
- [34] Egenç, T., Karasözen, B., Poisson Integrators for Volterra-Lattice Equations, *Applied Numerical Mathematics*, 56, 879-887, 2006.
- [35] Elconsul, A.M. and Logha, E.O., Compact Finite Differences Schemes for One-Dimensional Helmholtz Equation, *University of Bulletin*, Issue No:15, V:2, 2013.
- [36] El-Sayed, A.M.A., Fractional Derrivative and Fractional Differential Equations, Bulletin of the Faculty of Science, *Alexandra University*, Vol: 28, 18-22, 1988
- [37] El-Sayed, A.M.A., On The Fractional Differential Equations, *Applied Mathematics and Computation*, 49, 2-3, 1992.
- [38] El-Sayed, A.M.A., Linear Differential equations of Fractional Order, *Applied Mathematics and Computation*, 55, 1-12, 1993.
- [39] El-Sayed, A.M.A., Multivalued Fractional Differential Equations, *Applied Mathematics and Computation*, 80, 1-11, 1994.
- [40] El-Sayed, A.M.A., Fractional Differential Equations, *Kyungpook Mathematical Journal*, Vol:28, No:2, 119-192, 1998.
- [41] El-Sayed, A.M.A., Fractional Order Evolution Equations, *Journal of Fractional Calculus*, Vol: 7, 89-100, 1995.
- [42] Faou, E., Harrier, E., Pham, T.L., Energy Conservation With Non-symplectic Methods:Examples and counter-examples, *BIT*, 44, 699-709, 2004.

- [43] Fon, K., Cai, W., Ji, X., A Generalized Discontinuous Galerkin (GDG) Method for Schrödinger Equations with Smooth Solutions, *Journal of Computational Physics*, Vol:227, 2387-2410, 2008.
- [44] Forester, J.K., High Order Monotonic Convecting Differencing Schemes, *Journal of Computational Physics*, V:23, p:1-22, 1977.
- [45] Furihata, D., Matsuo, T, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, *Chapman and Hall*, 2010.
- [46] Gamet, L., Ducros, F., Nicoud, F. And Poinso, T., Compact Finite Difference Schemes on Non-uniform Meshes. Application to Direct Numerical Simulations of Compressible Flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, V:29, p:159-191, 1999.
- [47] Gao,G. And Sun, Z., A Compact Finite Difference Scheme for the Fractional Sub-Diffusion Equations, *Journal of Computational Physics*, V:230, p:586-595, 2011.
- [48] Gonzalez, O., Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems, *J. Non-linear Sci.*, 6, 449-467, 1996.
- [49] Guo, X., Xu, M., Some Physical applications of Fractional Schrödinger Equations, *Journal of Mathematical Physics*, Vol:47, 2006.
- [50] Guo, B., Han, Y., Xin, J., Existence of the Global Smooth Solution to the Period Boundary Value Problem of Fractional Nonlinear Schrödinger Equation, *Applied Mathematics and Computation*, Vol:204, Issue:1, 468-477, 2008.
- [51] Hairer, E., Lubich, C., Wanner, G., Geometric Numerical Integration. Structure Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, *Springer Series in Computational Mathematics* 31, Springer-Verlag, Berlin, 2nd edition, 2006.

- [52] Hairer, E., EnergyPreserving Variant of Collocation Methods, *Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics* , 1-12, 2010.
- [53] Haubold, H.J., Mathai, A. M., Saxena, R. K., Mittag-Leffler Functions and Their Applications, *Journal of Applied Mathematics*, Volume 2011, 298628.
- [54] Hemida, K.M., Mohamed, M. S., Gepreel, K. A., Analytic approximate Solutions to the Space-Time Nonlinear Partial Fractional Schödinger Equations,*Internatonal Journal of Pure and Applied Mathematics*, Vol:78, Issue:2, 233-243, 2012.
- [55] Hemker, P.W., Mixed Defect Correction Iteration for the Accurate Solution of the Convection Diffusion Equation. Multigrid Methods, *on proceedings of Conference Held in Köln-Porz*, Berlin, Springer-Verlag, p:485-501, 1982.
- [56] Herrmann, R., The Fractional Schrödinger Equation And The Infinite Potential Well - Numerical Results Using The Riesz Derivative, *Gamma Orionis Chronicles of Physics*, Vol:1, No:1, 1-12, 2013.
- [57] Herzallah, M. A. E., Gepreel, K. A., Approximate Solution to the Time-Space Fractional Cubic Nonlinear Schödinger Equation, *Applied Mathematical Modelling*, Vol:36, Issue:11, 5678-5685, 2012.
- [58] Hesameddini, E., Fotros, F., Solution for Time-Fractional Coupled Klein-Gordon Schödinger Equation Using Decomposition Method,*International Mathematical Forum*, Vol:7, No:21, 1047-1056, 2012.
- [59] Hirsh, R.S, Higher Order AccurateDifference Solution of Fluid Mechanics Problems by a CompactDifferencing Technique, *Journal of Computational Physics*, V:9(1), p:90-109, 1975.
- [60] Hu, J., Xin, J., Lu, H., The Global Solution for a Class of Systems of Fractional Nonlinear Schödinger Equation With Periodic Boundary Condition, *Computer Mathematics With Applications*, Vol:62, Issue:3, 1510-1521, 2011.

- [61] Hu, X. and Zhang, L., Implicit Compact Difference Schemes for the Fractional Cable Equation, *Applied Mathematical Modelling*, V:36, p:4027-4043, 2012.
- [62] Iavernaro, F., Pace, B., s-stage Trapezoidal Methods for the Conservation of Hamiltonian Functions of Polynomial Type, *Numerical Analysis and Applied Mathematics (AIP Conference Proceedings)*. , Vol:936, 603-606, 2007.
- [63] Iavernaro, F., Trigiante, D., High-Order Symmetric Schemes for the Energy Conservation of Polynomial Hamiltonian Problems, *Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics* , Vol:4, No.1-2, 87-101, 2009.
- [64] İsmail, M. S., Numerical Solutions of Coupled Nonlinear Schödinger Equation by Galerkin Method, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol:78, 532-547, 2008.
- [65] Karasözen, B., Erdem, Ö., Energy Preserving Methods for Volterra-Lattice Equation, *TWMS J. Appl. Eng. Math.*, Vol:1, No:2, 192-202, 2011.
- [66] Khan, N. A., Jamil, M., Ara, A., Approximate Solutions to Time-Fractional Schödinger Equation via Homptopy Analysis Method, *ISRN Mathematical Physics*, Vol:2012, 11 pages, 2012.
- [67] Kilbas, A.A. Trujillo, J.J., Differential Equations of Fractional Order: Methods, Results and Problems-I, *Applicable Analysis*, Vol. 78(1-2), 153-192, 2001.
- [68] Kilbas, A.A. Srivastava, Hari M. Trujillo, Juan J., Theory and Applications of Fractional Differential Equations, *Elsevier*, San Diego, 2006.
- [69] Kopal, Z., Numerical Analysis, *Willey*, NewYork, 1961.
- [70] Laskin, N., Fractional Quantum Mechanics, *Pyhs. Rev.*, E62(3), 3135-3145, 2000.
- [71] Laskin, N., Fractional Quantum Mechanics and Levy Path Integrals, *Physics Letters A*, Vol.28, 298-305, 2000.

- [72] Laskin, N., Fractional Schrödinger Equation, *Pyhs. Rev.*, E66, 056108, 2002.
- [73] Leimkuhler, B., Reich, S., Simulating hamiltonian Dynamics, *Cambridge University Press*, 2004.
- [74] Lele, S.K., Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution, *Journal of Computational Physics*, Vol:103, p:16-42,1992.
- [75] Liu, D., Kuang, W. And Tangborn A., High-Order Compact Implicit Difference Methods for Parabolic Equations in GeoDynamo Simulation, *Advances in Mathematical Physics*, 2009.
- [76] Lu, P., Oliveira, M. and Liu, C., High Order Compact Scheme for Dirichlet Boundary Points, Neural, *Parallel and Scientific Computations*, V:16, p:273-282, 2008.
- [77] Lu, P., Oliveira, M. and Liu, C., High Order Compact Scheme for Boundary Points, *International Journal of Computer Mathematics*, V:87, No:8, p:1795-1819, 2010.
- [78] MacKinnan, R.J. and Corey, G.F., Superconvergent Derivatives: A Taylor Series Analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, V:28, p:489-509, 1989.
- [79] MacKinnan, R.J. and Corey, G.F., Nodal Supercovergence and Solution Enhancement for a Class of Finite Element and Finite Difference Methods, *SIAM, Journal on Scientific and Statistical Computing*, V:11(2), p:343-353, 1990.
- [80] MacKinnan, R.J. and Johnson, R.W., Differential Equation Based Representation of Truncation Errors for Accurate Numerical Simulation, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, V:13, p:739-757, 1991.
- [81] MacKinnan, R.J. and Langerman, M.A., A Compact High-Order Finite-Element Method for Elliptic Transport Problems with Variable Coefficients, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, V:10, p:1-19, 1994.

- [82] MacKinnon, R.J. and Carey, G.F., Analysis of Material Interface Discontinuities and Superconvergent Fluxes in the Finite Difference Theory, *Journal of Computational Physics*, V:75(1), p:151-167, 1988.
- [83] McLaren, D.I., Quispel, G.R.W., Robidoux, N., Geometric Integration Using Discrete Gradients, *R. Soc. Lond. Philos. Trans. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 357, 1021-1045, 1999.
- [84] McLaren, D.I., Quispel, G.R.W., Integral Preserving Integrators, *Journal of Physics A:Math Gen.*,37, 489-495, 2004.
- [85] McLachlan, D.I., A New Implementation Symplectic Runge-Kutta Methods, 29, 1637-1649, 2007.
- [86] Mahesh, K., A Family of High Order Finite Difference Schemes with Good Spectral Resolution, *Journal of Computational Physics*, Vol:145, p:332-358, 1998.
- [87] Martins, J., Ribeiro, H. V., Evangelista, L. R., daSilva, L. R., Lenzi, E. K., Fractional Schrödinger Equation With Noninteger Dimensions, *Applied Mathematics and Computation*, Vol:219, Issue:4, 2313-2319, 2012.
- [88] Miller, S. K., Ross, B., An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations, *John Wiley Sons*, NewYork, 1993.
- [89] Mohebbi, A. and Dehghan, M., The Use of Compact Boundary Value Method for the Solution of two-Dimensional Schrödinger Equation, *Journal of Computational Applied Mathematics*, Vol:225, p:124-134, 2009.
- [90] Mohebbi, A. and Dehghan, M., High-Order Compact Solution of the One-Dimensional heat and Advection-Diffusion Equations, *Applied mathematical modelling*, V:34, p:3071-3084, 2010.
- [91] Mohebbi, A., Abbaszadeh, M., Dehghan, M., The Use of a Meshless Technique Based on a Collocation and Radial Basis Functions For Solving the

- Time-Fractional Nonlinear Schödinger Equation Arising in Quantum Mechanics, *Engineering Analysis With Boundary Elements*, Vol:37, 475-485, 2013.
- [92] Mutlu, H., FZM431-İleri Kuantum Mekanığı, *Ders Notları*, Ankara, Şubat, 2009.
- [93] Nabavi, M., Kamran Siddiqui, M.H., Javad Dargahi, M., A New 9-Point Sixth-Order Accurate Compact Finite Difference Method for the Helmholtz Equation, *Journal of Sound and Vibration*, Vol:307, p:972-982, 2007.
- [94] Nabavi, M., Siddiqui, M.H.K. and Dargahi, J., A New 9-Point Sixth-Order Compact Finite Difference Method for the Helmholtz Equation, *Journal of Sound and Vibration*, V:307, p:972-982, 2007.
- [95] Naber, M., Time Fractional Schödinger Equation, *Journal of Mathematical Physics*, Vol.45, No:8, 3339-3352, 2004.
- [96] Odibat, Z., Mamani, S., Alawneh, A., Analytic study on Time-Fractional Schödinger Equations: Exact Solutions by GDTM, *International Symposium on Nonlinear Dynamics*, Shanghai-China, 2007.
- [97] Okoro, F.M., Owoloko, A.E., Compact Finite Difference Schemes for Poisson equation using Direct Solver, *Journal of Mathematics and Technology*, ISSN:2078-0257, no:3, August, 2010.
- [98] Podlubny, I., Fractional Differential Equations, *Academic Press*, San Diego, 1999.
- [99] Quispel, G.R.W., Capel,H.W., Solving ODEs Numerically While Preserving a First Integral, *Physics Letters A*, 218, 223-228, 1996.
- [100] Quispel, G.R.W., McLaren, D.I., A New Class of Energy Preserving Numerical Integration Methods, *Journal of Physics A:Math Theor.* 41, 045206, 7 pp, 2008.
- [101] Rahimy, M., Applications of Fractional Differential Equations, *Applied Mathematical Sciences*, Vol:4, No:50, 2453-2561, 2010.

- [102] Rehman, M. and Khan R.A., A Note on Baudary Value Problems for a Coupled System of Fractional Differential Equations, *Computers and Mathematics with Applications*, V:61, p:2630-2637, 2011.
- [103] Rido, S. Z., El-Sherbiny, H. M., Arafa, A. A. M., On the solution of the Fractional Nonlinear Schödinger Equation, *Physics Letters A*, Vol:372, Issue:5, 553-558, 2008.
- [104] Ross, Shepley L., Introduction To Ordinary Differential Equations, *John Wiley Sons Inc.*, 1980.
- [105] Rozmej, P., Bandrowski, B., On Fractional Schödinger Equation, *Computational Methods in Science and Technology*, Vol:16, Issue:2, 191-194, 2010.
- [106] Samko, S. G., Kilbas, A. A., Marichev, O. I., Integrals and Derrivatives of the Fractional Order and Some Of Their Applications, *Nauka i Technica*, Minsk, 1978.
- [107] Sandvik, A. W., PY502 Computational Physics Lecture Notes, *Boston University*, Fall 2012.
- [108] Sanz-Serna, J.M., Calvo, M.P., Numerical Hamiltonian problems, *Chapman and Hall*, 1994.
- [109] Saxena, R. K., Saxena, R., Kalla, S. L., Computational Solution of a Fractional Generalization of the Schödinger Equation Occuring in Quantum Mechanics, *Applied Mathematics and Computation*, Vol:216, Issue:5, 1412-1417, 2010.
- [110] Şenyel, M, Ayberk, Ş., Kuantum Fiziği, Ders Notları-Ünite 3, *AÜ*.
- [111] Serway, R. A., çev: Çolakoğlu, K., Fen ve Mühendislik İçin Fizik Modern Fizik İlaveli, *Palme Yayıncılık*, Ankara, 1996.
- [112] Shampine, L.F., Consevation Lawsand the Numerical Solutions of ODEs, *Comput. Math. Appl.*, 12B, 1287-1296, 1986.

- [113] Shlizerman, E. and Rom-Kedar, V., Three types of Chaos in the Forced Nonlinear Schrödinger Equation, *Physical Review Letters*, Vol:96, Issue:2, 4 sayfa, 2006.
- [114] Spotz, W.F., High-Order Compact Difference Schemes for Computational Mechanics, *PhD Thesis*, University of Texas, 1995.
- [115] Spotz, W.F. and Carey, G.F., High-Order Compact Difference Methods, *on proceeding of ICOSAHOM-95*, p:397-407, 1996.
- [116] Strikwerda, J., Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations, SIAM, 2004.
- [117] Strong, G., Linear Algebra and Its Applications, *Harcort Brace Jovanovich*, San Diego, 1988.
- [118] Sun, H., Kong, N., Zhang, J., Carlson, S.E., A Fourth Order Compact Difference Scheme on face Centered Cubic Grids with Multigrid Method for Solving 2D Convection-Diffusion Equation, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol:63, p:651-661, 2003.
- [119] Sutmann, G., Compact Finite Difference Schemes of Sixth Order Method for the Helmholtz Equation, *Journal of Computational Applied Mathematics*, Vol:293,p:15-31, 2007.
- [120] Vuletic, V., Quantum Physics I, Lecture Notes-X, *MIT, Spring-2006*.
- [121] Wang, Y., Zhang, J., Sixth Order Compact Scheme Combined with Multigrid Method and Extrapolation Technique for 2D Poisson Equation, *Journal of Computational Physics*, Vol:228, p:137-146, 2009.
- [122] Wang, J., Zhou, Y., Wei, W., Fractional Schrödinger Equations With Potential Optimal Controls, *Nonlinear Applications: Real World Applications*, Vol:13, Issue:6, 2755-2766, 2012.
- [123] Wei, L., Yimian, H., Zhang, X., Wang, S., Analysis of an Implicit Fully Discrete Local Discontinuous Galerkin Method for the Time-Fractional Sc-

- hödinger Equation, *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol:59, 28-34, 2012.
- [124] Wei, L., Zhang, X., Kumar, S., Yildirim, A., A Numerical Study Based on an Implicit Fully Discrete Local Discontinuous Galerkin Method for the Time-Fractional Coupled Schödinger Equation, *Computer and Mathematics With Applications*, Vol:64, Issue:8, 2603-2615, 2012.
- [125] Xu, Y., Shu, C., Local Discontinuous Galerkin Methods For Nonlinear Schödinger Equation, *Journal of Computational Physics*, Vol:205, 72-97, 2005.
- [126] Yilmazer, R., Baş, E., Explicit Solutions of Fractional Schödinger Equation via Fractional Calculus Operators, *International Journal of Open Problems in Computer Science and Mathematics (IJOPCM)*, Vol:5, Issue:2, 2012.
- [127] Zhang, J., An Explicit Fourth-Order Compact Finite Difference Scheme for the Three Dimensional Convection-Diffusion Equation, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, Vol:14, p:209-218, 1998.
- [128] Zhang, S., Positive Solutions for Boundary-Value Problems of Non-Linear Fractional Differential Equations, *Electronic Journal Of Differential Equations*, No.36, 1-12, (2006).
- [129] Zhao, J., Davison, M. and Corless, R.M., Compact Finite Difference Method for American Option Pricing, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, V:206, p:306-321, 2007.
- [130] Zhao, J., Corless, R.M., Compact Difference Method for High Order Integro-Differential Equations, *Applied Mathematics and Computation*, Vol:221, p:66-78, 2013.

ÖZGEÇMİŞ

Neslihan Fatma ER, 18 Şubat 1970 Kastomonu doğumludur.1986 yılında İstanbul Şehremini Lisesinden mezun olduktan sonra 1991 yılında Marmara Üniversitesi Atatürk Eğitim Fakültesi İngilizce Fizik Öğretmenliği Bölümünden mezun olmuştur. Aynı yıl İTÜ Nükleer Enerji Enstitüsü Nükleer Uygulamalar Ana Bilim dalında yüksek lisans eğitimine ve beraberinde Fizik öğretmenliğine başlamıştır. Bu alandaki yüksek lisans derecesini 1995 yılında almıştır. On altı yıl boyunca ingilizce eğitim yapan kolejlerde fizik öğretmenliği ve Fen Bilimleri Bölüm Başkanlığı görevlerini yürütmüştür. 2008 yılında Kadir Has Üniversitesi'nde Fizik okutmanı olarak göreve başlamış, aynı yıl burada başladığı Enformasyon Teknolojileri yüksek lisans programını 2010 yılında tamamlayarak ikinci yüksek lisans derecesini almıştır. 2011 yılı Şubat ayında İstanbul Kültür Üniversitesi Matematik-Bilgisayar Ana Bilim Dalı Matematik programında doktora öğrenciliği başlamış ve aynı yıl bu üniversitede öğretim görevlisi olarak çalışmaya başlamıştır. Halen İstanbul Kültür Üniversitesi Uzaktan Eğitim Merkezi (UZEMER) bünyesinde Uzaktan Eğitim Uygulama Sorumlusu olarak görevine devam etmektedir. Evli ve iki erkek çocuk sahibidir.