

T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MATEMATİK ANABİLİM DALI

SCHRÖDİNGER DENKLEMİ İÇİN
BAŞLANGIÇ SINIR DEĞER PROBLEMİNİN
NÜMERİK ÇÖZÜMÜ


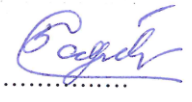
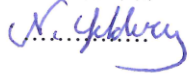
Murat VARGÜN
YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN
Prof. Dr. Gabil YAGUB

EYLÜL-2013
KARS

Prof. Dr. Gabil YAGUB'un danışmanlığında Murat VARGÜN'ün Yüksek Lisans Tezi olarak hazırladığı "Schrödinger Denklemi için Başlangıç Sınır Değer Probleminin Nümerik Çözümü" adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalında oy.....*birliği*..... ile kabul edilmiştir.

06/09/2013

	Adı Soyadı	İmza
Başkan	: Prof. Dr. Emine MISIRLI	
Üye	: Prof. Dr. Gabil YAGUB	
Üye	: Yrd. Doç. Dr. Nigar YILDIRIM AKSOY	

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu' nun/...../20.... gün ve/..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Doç.Dr. Muzaffer ALKAN
Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalında yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır.

Çalışmada Schrödinger denklemi için I. ve II. çeşit başlangıç sınır değer problemleri ve onların nümerik çözümü ele alınmıştır. İlk önce ele alınan sınır değer problemleri için fark şemaları oluşturulmuş ve bu fark şemalarının kararlılığı için kestirimler elde edilmiştir. Bu kestirimlerden yararlanılarak fark şemasının hatası değerlendirilmiş, sonlu farklar yönteminin yakınsaklığının hızını gösteren kestirimler elde edilmiştir. Ele alınan sınır değer problemlerinin nümerik çözüm algoritması oluşturulmuştur.

Tez çalışmam sırasında yardım ve desteklerini esirgemeyen, yoğun çalışmalarından bana zaman ayırarak derin bilgilerinden faydalanma fırsatı veren, öğrencisi olmaktan her zaman gurur duyduğum değerli bilim adamı Matematik Anabilim Dalı Başkanı Sayın Prof. Dr. Gabil YAGUB hocama en derin saygılarımı ve teşekkürlerimi sunarım. Çalışmalarım esnasında yine katkılarını esirgemeyen Matematik Anabilim Dalı öğretim üyesi Sayın Yrd. Doç. Dr. Nigar YILDIRIM AKSOY hocama ve ayrıca tezin hazırlanması sürecinde manevi desteğini her zaman hissettiğim aileme teşekkürlerimi sunarım.

Kars - 2013

Murat VARGÜN

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	ii
İÇİNDEKİLER	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
SİMGELER DİZİNİ	vi
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL TEMELLER	2
3. MATERYAL VE YÖNTEM	6
3.1 Schrödinger Denklemi İçin 1.Çeşit Başlangıç Sınır Değer Probleminin Nümerik Çözümü.....	6
3.1.1 Başlangıç Sınır Değer Probleminin Formülize Edilmesi ve Fark Şemasının Oluşturulması.....	6
3.1.2 Fark Şemasının Çözüm İçin Kararlılık Kestirimi.....	9
3.1.3 Fark Şemasının Hatası İçin Kestirim.....	11
3.2 Schrödinger Denklemi İçin 2.Çeşit Başlangıç Sınır Değer Probleminin Nümerik Çözümü.....	23
3.2.1 Başlangıç Sınır Değer Probleminin Formülize Edilmesi ve Fark Şemasının Oluşturulması.....	23
3.2.2 Fark Şemasının Kararlılık ve Hata Kestirimleri.....	26
3.2.3 Nümerik Çözüm Algoritması.....	32
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	36
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	37
6.KAYNAKLAR	38
ÖZGEÇMİŞ	40

ÖZET

Bu tezde Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemleri ele alındı. Bu çalışmanın 3.1. bölümünde 1. çeşit başlangıç sınır değer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark şeması oluşturuldu, Cauchy-Bunyakovskii eşitsizliği ve Gronwall lemması uygulanarak kararlılık kestirimi elde edildi ve kararlılık kestirimi kullanılarak fark şemasının hatası için kestirim ispatlandı.

Çalışmanın 3.2. bölümünde ise 2. çeşit başlangıç sınır değer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark şemasının çözümü için kararlılık kestirimi elde edildi ve bu kestirim kullanılarak fark şemasının hatası değerlendirildi. Ayrıca son olarak 1. ve 2. çeşit başlangıç sınır değer problemlerinin nümerik çözümleri için algoritma verildi.

2013-40 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Schrödinger denklemi, Sınır Değer Problemi, Sonlu Farklar Yöntemi, Fark Şeması, Kararlılık, Yakınsama

ABSTRACT

In this thesis, the initial- boundary value problems are studied for equation of Schrödinger. In the 3.1., section, describing first-type initial-boundary value problem, a difference scheme belong to this problem is constituted. Applying Cauchy-Bunyakovskii inequality and Gronwall lemma for the solution of difference scheme, a stability estimation is obtained. Using the stability estimation an estimation for the error of difference scheme is obtained.

In the 3.2. section, describing the second-type initial-boundary value problem, a stability estimation for the solution of difference scheme belong to this problem is obtained. Using obtained estimation, the error of difference scheme is evaluated. Finally, in the 3.2. section, an algorithm is given for the numerical solutions of first and second-type initial- boundary value problem.

2013 – 40 Pages

Keywords: Schrödinger equation, Boundary value problem, Finite difference method, Difference Scheme, Stability, Convergence.

SİMGELER DİZİNİ

Şimdi tezde kullanılan temel simgeleri gösterelim:

\forall	herhangi
$\overset{0}{\forall}$	hemen hemen her yerde
$l > 0$	verilen sayı
$T > 0$	verilen sayı
$a(x)$	ölçülebilir reel değerli fonksiyon
$x \in [0, l]$	bağımsız değişken
$t \in [0, T]$	bağımsız değişken
[.....]	kaynak numarası sayfa
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	iç çarpım işareti
$\tau > 0$	t değişkenine göre adım
$h > 0$	x değişkenine göre adım
$\delta_t^- \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{jk-1}}{\tau}$	t'ye göre sol fark
$\delta_x^- \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{j-1k}}{h}$	x'e göre sol fark
$\delta_x \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - \Phi_{jk}}{h}$	x'e göre sağ fark
$\delta_{xx}^- \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - 2\Phi_{jk} + \Phi_{j-1k}}{h^2}$	x'e göre 2. mertebeden fark

1. GİRİŞ

Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemleri lineer olmayan optikte, çağdaş tekniğin ve fiziğin çeşitli alanlarında ortaya çıkar. Bu nedenle Schrödinger denklemi için sınır değer problemlerinin nümerik çözümü gerek pratik açıdan gerekse teorik açıdan büyük önem taşır [4, 5, 7, 8, 13].

Söylemek gerekir ki Schrödinger denklemi için sınır değer problemleri başka bir deyişle durgun olmayan Schrödinger denklemi için sınır değer problemlerinin nümerik çözümü ilk önce [1-4, 6-8, 11 ,12 ,16-19] çalışmalarında incelenmiştir. Bu çalışmalarda söz konusu problemlere sonlu farklar yöntemi uygulanmış ve sonlu farklar yönteminin yakınsaklığına ait çeşitli sonuçlar elde edilmiştir.

Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemleri ilk önce [4, 15] çalışmasında incelenmiş ve söz konusu problemlerin genelleştirilmiş çözümünün varlığı ve tekliğine ait hükümler ispatlanmıştır. Bu sonuçlar Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemlerinin nümerik çözümlerinin incelenmesinde önemli rol oynamıştır. Söylemek gerekir ki Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemlerinin nümerik çözümü ilk kez [4, 15] çalışmalarında incelenmiştir. Schrödinger denklemi için başlangıç sınır değer problemleri ve onların nümerik çözümü çok az incelendiğinden tez konusu günceldir ve konunun incelenmesi gerek teorik gerekse pratik anlamda önem taşımaktadır.

Tezin içeriğinin materyal ve yöntem bölümü iki alt bölümden, yani 3.1, 3.2 bölümlerinden oluşmaktadır. 3.1. bölümünde 1. çeşit başlangıç sınır değer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark şeması oluşturulup, fark şemasının çözümü için kararlılık kestirimi elde edilmiş ve kararlılık kestirimi kullanılarak fark şemasının hatası için kestirim ispatlanmıştır. Çalışmanın 3.2. bölümünde ise 2. çeşit başlangıç sınır değer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark şemasının çözümü için kararlılık kestirimi elde edilmiştir.

2. KURAMSAL TEMELLER

Bu bölümde ilerleyen konularda geçen tanımlar ve teoremler verilecektir.

Tanım 2.1: $L_2(0, \ell)$ Hilbert Uzayı olup elemanları $(0, \ell)$ aralığında ölçülebilir ve mutlak değerinin karesiyle integrallenebilir fonksiyonlar uzayıdır. Burada iç çarpım ve norm aşağıdaki gibidir:

$$\langle u, v \rangle_{L_2(0, \ell)} = \int_0^{\ell} u(x) \bar{v}(x) dx,$$
$$\|u\|_{L_2(0, \ell)} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{L_2(0, \ell)}}.$$

Tanım 2.2: $L_2(\Omega)$ Hilbert Uzayı olup elemanları Ω bölgesinde ölçülebilir ve mutlak değerinin karesiyle integrallenebilir fonksiyonlar uzayıdır. Burada iç çarpım ve norm aşağıdaki gibidir:

$$\langle \psi, \phi \rangle_{L_2(\Omega)} = \int_{\Omega} \psi(x, t) \bar{\phi}(x, t) dx dt,$$
$$\|\psi\|_{L_2(\Omega)} = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle_{L_2(\Omega)}}.$$

Tanım 2.3: $L_{\infty}(0, \ell)$ Banach uzayı olup, elemanları $(0, \ell)$ aralığında ölçülebilir ve sınırlı fonksiyonlar uzayıdır. Burada norm aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\|u\|_{L_{\infty}(0, \ell)} = \text{vria max}_{x \in (0, \ell)} |u(x)|, \quad x \in (0, \ell) = \text{ess sup}$$

Tanım 2.4: $W_2^1(0, \ell)$ Sobolev uzayı olup, elemanlarının kendisi ve onların x 'e göre birinci mertebeden geliştirilmiş türevleri $L_2(0, \ell)$ Lebesgue uzayından olan fonksiyonlar uzayıdır. Bu uzay aynı zamanda Hilbert uzayıdır. Bu uzayda iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle u, v \rangle_{W_2^1(0, \ell)} = \int_0^{\ell} \left[u(x) \bar{v}(x) + \frac{du(x)}{dx} \frac{d\bar{v}(x)}{dx} \right] dx,$$
$$\|u\|_{W_2^1(0, \ell)} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{W_2^1(0, \ell)}}.$$

Burada $\bar{v}(x)$ fonksiyonu $v(x)$ 'in kompleks eşleniğidir. $W_2^0(0, \ell)$ uzayı $W_2^1(0, \ell)$ uzayının alt uzayı olup, elemanları 0 ve ℓ noktalarında 0'a eşit olur.

Tanım 2.5: $W_2^2(0, \ell)$ Sobolev uzayı olup, elemanlarının kendisi ve x 'e göre ikinci mertebeden genelleştirilmiş türevleri $L_2(0, \ell)$ 'den olan fonksiyonların uzayıdır. Aynı zamanda Hilbert uzayıdır. Bu uzayda iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle u, v \rangle_{W_2^2(0, \ell)} = \int_0^\ell \left[u(x)\bar{v}(x) + \frac{du(x)}{dx} \frac{d\bar{v}(x)}{dx} + \frac{d^2u(x)}{dx^2} \frac{d^2\bar{v}(x)}{dx^2} \right] dx,$$

$$\|u\|_{W_2^2(0, \ell)} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{W_2^2(0, \ell)}}.$$

$W_2^0(0, \ell)$ uzayı $W_2^2(0, \ell)$ 'in alt uzayı olup elemanlarının kendisi 0 ve ℓ noktalarında 0'a eşit olur.

Tanım 2.6: $W_2^3(0, \ell)$ Hilbert uzayı olup, elemanları $(0, \ell)$ aralığında tanımlı $u, \frac{du}{dx}, \frac{d^2u}{dx^2}, \frac{d^3u}{dx^3} \in L_2(0, \ell)$ olan $u = u(x)$ fonksiyonlarının Sobolev uzayıdır. Bu uzayda iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle u, v \rangle_{W_2^3(0, \ell)} = \int_0^\ell \sum_{j=0}^3 \frac{d^j u(x)}{dx^j} \frac{d^j \bar{v}(x)}{dx^j} dx,$$

$$\|u\|_{W_2^3(0, \ell)} = \sqrt{\langle u, u \rangle_{W_2^3(0, \ell)}}.$$

Tanım 2.7: $W_2^{0,1}(\Omega)$ uzayı Sobolev uzayı olup, elemanlarının kendisi ve onların t 'ye göre birinci mertebeden genelleştirilmiş kısmi türevleri $L_2(\Omega)$ Lebesgue uzayından olan fonksiyonlar uzayıdır. Bu uzayda iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle \psi, \nu \rangle_{W_2^{0,1}(\Omega)} = \int_{\Omega} \left[\psi(x,t) \bar{\nu}(x,t) + \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \frac{\partial \bar{\nu}(x,t)}{\partial t} \right] dxdt ,$$

$$\|\psi\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle_{W_2^{0,1}(\Omega)}} .$$

Tanım 2.8: $W_2^{1,0}(\Omega)$ uzayı Sobolev uzayı olup, elemanlarının kendisi ve onların x 'e göre birinci mertebeden genelleştirilmiş kısmi türevleri $L_2(\Omega)$ 'den olan fonksiyonlar uzayıdır. Bu uzay aynı zamanda Hilbert uzayıdır. Burada iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle \psi, \nu \rangle_{W_2^{1,0}(\Omega)} = \int_{\Omega} \left[\psi(x,t) \bar{\nu}(x,t) + \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \frac{\partial \bar{\nu}(x,t)}{\partial x} \right] dxdt ,$$

$$\|\psi\|_{W_2^{1,0}(\Omega)} = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle_{W_2^{1,0}(\Omega)}} .$$

$W_2^{0,1,0}(\Omega)$ uzayı $W_2^{1,0}(\Omega)$ uzayının alt uzayı olup, elemanları Ω dikdörtgeninin yan taraflarında sifıra eşittir.

Tanım 2.9: $W_2^{2,1}(\Omega)$ Hilbert uzayı olan Sobolev uzayıdır. Elemanları Ω bölgesinde tanımlı $\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \frac{\partial \psi}{\partial t} \in L_2(\Omega)$ özelliklerini sağlayan $\psi(x,t)$ fonksiyonlarıdır. Burada iç çarpım ve norm aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$\langle \psi, \phi \rangle_{W_2^{2,1}(\Omega)} = \int_{\Omega} \left[\psi(x,t) \bar{\phi}(x,t) + \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \frac{\partial \bar{\phi}(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \bar{\phi}(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \frac{\partial \bar{\phi}(x,t)}{\partial t} \right] dxdt ,$$

$$\|\psi\|_{W_2^{2,1}(\Omega)} = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle_{W_2^{2,1}(\Omega)}} .$$

$W_2^{0,2,1}(\Omega)$ uzayı $W_2^{2,1}(\Omega)$ uzayının alt uzayı olup, elemanları Ω dikdörtgeninin yan taraflarında sifıra eşittir.

Tanım 2.10 : (Bramble – Hilbert Lemması, Samarskiy A.A., 1987). D bölgesi E_n Euclid uzayının $d > 0$ çapına sahip açık, konveks sınırlı bir bölgesi olsun. Ayrıca,

$$g(u) \in W_2^m(D) \left(0 < m = \bar{m} + \lambda, \bar{m} - \text{negatif olmayan tamsayı}, 0 < \lambda \leq 1 \right)$$

biçiminde lineer ve sınırlı bir fonksiyonel olsun.

Yani, $|g(u)| \leq C \left(\sum_{j=0}^m d^{2j} |u|_{j,D}^2 + d^{2m} |u|_{m,D}^2 \right)^{1/2}$ şartı sağlansın. Eğer $g(u)$ \bar{m} 'nci

dereceden polinomda sıfıra eşit ise, bu taktirde;

$|g(u)| \leq C \cdot \bar{C} \cdot d^m \cdot |u|_{m,D}$ olacak şekilde $\bar{C} > 0$ sayısı vardır. Burada $|u|_{m,D}$, $W_2^m(D)$ 'de yarı normdur.

Tanım 2.11 : (Gronwall Lemması, Vasilyev F.P., 1981). $a \geq 0, b \geq 0$ olmak üzere $\varphi_j, j = \overline{0, N}$ sayıları

$$0 \leq \varphi_0 \leq a, 0 \leq \varphi_{j+1} \leq a + b \sum_{m=0}^j \varphi_m, j = \overline{0, N-1}$$

şartlarını sağlıyor ise bu taktirde

$$0 \leq \varphi_j \leq a(1+b)^j, j = \overline{0, N}$$

eşitsizliği geçerlidir. Eğer

$$0 \leq \varphi_{j-1} \leq a + b \sum_{m=j}^{N-1} \varphi_m, j = \overline{0, N-1}, 0 \leq \varphi_{N-1} \leq a,$$

şartları sağlanıyor ise bu taktirde

$$0 \leq \varphi_j \leq a(1+b)^{N-j-1}, j = \overline{0, N-1}$$

eşitsizliği geçerlidir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Schrödinger Denklemi İçin 1.çeşit Başlangıç Sınır Değer Probleminin Nümerik Çözümü

Bu bölümde Schrödinger denklemi için 1.çeşit başlangıç sınır değer probleminin fark şeması oluşturulacak, fark şeması için kararlılık kestirimi elde edilecek ve sonlu fark yaklaşımı için yakınsama hızı gösterilecektir.

Bu bölüm üç alt bölümden oluşmaktadır.

3.1.1 Başlangıç Sınır Değer Probleminin Formülize Edilmesi ve Fark Şemasının Oluşturulması

Bu alt bölümde ele alınan Schrödinger denklemi için 1.çeşit başlangıç sınır değer problemini tanımlayalım.

$\ell > 0, T > 0$ verilen sayılar, $0 \leq x < \ell, 0 \leq t \leq T, \Omega_T = (0, \ell) \times (0, T), \Omega = \Omega_T$ olsun.

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a(x)\psi + V(t)\psi = f(x, t), \quad (x, t) \in \Omega, \quad (3.1.1.1)$$

denkleminin

$$\psi(x, 0) = \varphi(x), \quad x \in (0, \ell) \quad (3.1.1.2)$$

başlangıç değer ve

$$\psi(0, t) = \psi(\ell, t) = 0, \quad t \in (0, T) \quad (3.1.1.3)$$

sınır değer şartları altında çözümünün bulunması problemini göz önüne alalım.

Burada $a_0 > 0$ verilen sayı, $a(x), V(t)$ fonksiyonları ölçülebilir reel değerli olup

$$0 \leq a(x) \leq \mu_0, \quad \left| \frac{da(x)}{dx} \right| \leq \mu_1, \quad (3.1.1.4)$$
$$\forall x \in (0, \ell), \quad \mu_0, \mu_1 = \text{sabit} > 0,$$

$$|V(t)| \leq b_0, \left| \frac{\partial V(t)}{\partial t} \right| \leq b_1, b_0, b_1 = \text{sabit} > 0 \quad (3.1.1.5)$$

şartları sağlar. $\varphi(x), f(x,t)$ fonksiyonları ölçülebilir kompleks değerli olup

$$\varphi \in W_2^3(0, \ell), \varphi(0) = \varphi(\ell) = L\varphi(0) = L\varphi(\ell) = 0 \quad (3.1.1.6)$$

$$f, \frac{\partial f}{\partial x} \in W_2^{0,1}(\Omega), f(0,0) = f(\ell,0) = 0 \quad (3.1.1.7)$$

$$\frac{\partial f(0,t)}{\partial t} = \frac{\partial f(\ell,t)}{\partial t} = 0, t \in (0,T)$$

şartlarını sağlar. Burada

$$L\varphi = -a_0 \frac{d^2\varphi}{dx^2} + a(x)\varphi \quad (3.1.1.8)$$

biçimindedir.

Tanım 3.1.1.1 : (3.1.1.1) – (3.1.1.3) başlangıç sınır değer probleminin çözümü olarak $W_2^{0,2,1}(\Omega)$ uzayına ait olan (3.1.1.1) denklemi $\forall (x,t) \in \Omega$ için, (3.1.1.2) başlangıç şartını $\forall x \in (0, \ell)$ için ve (3.1.1.3) sınır değer şartlarını $\forall t \in (0,T)$ için sağlayan $\psi = \psi(x,t)$ fonksiyonu anlaşılır.

Söylemek gerekir ki (3.1.1.1) – (3.1.1.3) başlangıç sınır değer problemi daha önce [4, 15] çalışmalarında incelenmiş ve bu çalışmalar sonucunda belirtilmiştir ki başlangıç sınır değer probleminin $W_2^{0,2,1}(\Omega)$ uzayına ait olan bir tek çözümü vardır ve bu çözümü için aşağıdaki kestirim geçerlidir.

$$\|\psi\|_{W_2^{0,2,1}(\Omega)} \leq c_0 \left(\|\varphi\|_{W_2^{0,2}(\Omega,\ell)} + \|f\|_{W_2^{0,0,1}(\Omega)} \right). \quad (3.1.1.9)$$

Burada $c_0 > 0$ sabiti φ ve f den bağımsızdır. Problemin verileri yeteri kadar düzgün olduğundan, yani (3.1.1.4) – (3.1.1.7) şartları sağlandığından başlangıç sınır değer probleminin düzgün çözümler’de çalışılmış, incelenmiş ve çözüm için (3.1.1.9) yanı sıra aşağıdaki değerlendirme elde edilmiştir.

$$\left\| \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right\|_{L_2(\Omega)} + \left\| \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} \right\|_{L_2(\Omega)} \leq c_1 \left(\|\varphi\|_{W_2^3(\Omega,\ell)} + \|f\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} + \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} \right) \quad (3.1.1.10)$$

Burada $c_1 > 0$ sabiti φ ve f den bağımsızdır.

Şimdi (3.1.1.1) – (3.1.1.3) problemine karşılık gelen farklar şemasını oluşturmaya çalışalım. Bu amaçla ilk önce $\bar{\Omega} = [0, \ell] \times [0, T]$ bölgesini ağa dönüştürelim.

Farz edelim ki h ile x değişkenine göre adım, τ ile t değişkenine göre adım gösterilsin.

$$\{(x_j, t_k)\}, \quad x_j = jh - \frac{h}{2}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad x_0 = x_1 - \frac{h}{2} = 0, \quad x_m = x_{m-1} + W_L = \ell$$

$$t_k = k\tau, \quad k = \overline{0, N}, \quad h = \frac{\ell}{M-1}, \quad \tau = \frac{T}{N}.$$

Burada $M > 0$, $N > 0$ verilen tamsayılardır ve

$$\delta_t \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{jk-1}}{\tau}$$

$$\delta_x \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{j-1k}}{h}, \quad \delta_x \Phi_{1k} = \frac{2(\Phi_{1k} - \Phi_{0k})}{h}$$

$$\delta_x \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - \Phi_{jk}}{h}, \quad \delta_x \Phi_{M-1k} = \frac{2(\Phi_{Mk} - \Phi_{M-1k})}{h}$$

$$\delta_{xx} \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - 2\Phi_{jk} + \Phi_{j-1k}}{h^2} = \frac{\delta_x \Phi_{jk} - \delta_x \Phi_{jk}}{h}$$

gösterimlerini yapalım. Burada $\Phi_{jk} = \Phi(x_j, t_k)$ fonksiyonu $\{(x_j, t_k)\}$ ağında tanımlanan ağ fonksiyonudur.

(3.1.1.1) – (3.1.1.3) sınır değer probleminin sonlu fark ayısını aşağıdaki fark şeması biçiminde yazabiliriz:

$$i\delta_t \Phi_{jk} + a_0 \delta_{xx} \Phi_{jk} - a^j \Phi_{jk} + V_k \Phi_{jk} = f_{jk}, \quad (3.1.1.11)$$

$$j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}$$

$$\Phi_{j0} = \varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad (3.1.1.12)$$

$$\Phi_{0k} = \Phi_{Mk} = 0, \quad k = \overline{1, N}, \quad (3.1.1.13)$$

Burada a^j , φ_j , f_{jk} , V_k ağ fonksiyonları olup aşağıdaki formüllerle tanımlanır.

$$a^j = \frac{1}{h} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} a(x) dx, \quad j = \overline{1, M-1} \quad (3.1.1.14)$$

$$\varphi_j = \frac{1}{h} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} \varphi(x) dx, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad \varphi_0 = \varphi_M = 0 \quad (3.1.1.15)$$

$$f_{jk} = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} f(x, t) dx dt, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N} \quad (3.1.1.16)$$

$$V_k = \frac{1}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} v(t) dt, \quad k = \overline{1, N} \quad (3.1.1.17)$$

3.1.2. Fark Şemasının Çözümü İçin Kararlılık Kestirimi

Şimdi önce (3.1.1.9) – (3.1.1.13) fark şeması için kararlılık kestirimi elde edelim.

Teorem 3.1.2.1: $a(x)$, $V(t)$, $\varphi(x)$, $f(x, t)$ fonksiyonları (3.1.1.4) – (3.1.1.7) şartlarını sağlasın ve a^j , φ_j , f_{jk} , V_k ağ fonksiyonları (3.1.1.14) – (3.1.1.17) formülleri ile tanımlansın. Bu taktirde (3.1.1.11) – (3.1.1.14) fark şemasının çözümü için aşağıdaki değerlendirme geçerlidir:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |\Phi_{jm}|^2 \leq c_1 \left(h \sum_{j=1}^{M-1} |\varphi_j|^2 + \tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |f_{jk}|^2 \right), \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (3.1.2.1)$$

Burada $c_1 > 0$ sayısı τ ve h den bağımsızdır.

İspat: Gözükteği gibi her bir $t = t_k$ için (3.1.1.11) – (3.1.1.14) fark şeması aşağıdaki toplam özdeşliğine denktir:

$$\begin{aligned} & h \sum_{j=1}^{M-1} i \delta_t \Phi_{jk} \bar{\eta}_{jk} - h \sum_{j=1}^M a_0 \delta_x \Phi_{jk} \delta_x \bar{\eta}_{jk} - \\ & h \sum_{j=1}^{M-1} a^j \Phi_{jk} \bar{\eta}_{jk} = h \sum_{j=1}^{M-1} f_{jk} \bar{\eta}_{jk}, \quad k = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (3.1.2.2)$$

Burada $\bar{\eta}_{jk}$ ağ fonksiyonu η_{jk} fonksiyonunun kompleks eşleneğidir ve η_{jk} ise $\eta_{0k} = \eta_{Mk} = 0, k = \overline{1, N}$ şartını sağlayan $\{(x_j, t_k)\}$ da tanımlanan herhangi ağ fonksiyonudur. Bu toplam özdeşliğinde $\bar{\eta}_{jk}$ 'nın yerine $\tau\bar{\Phi}_{jk}$ ağ fonksiyonunu alıp elde edilen eşitlikten onun kompleks eşleneğini çıkarmış olursak aşağıdaki eşitliği elde ederiz:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} \tau \left(\delta_{\tau} \Phi_{jk} \cdot \bar{\Phi}_{jk} + \delta_t \bar{\Phi}_{jk} \cdot \Phi_{jk} \right) = 2\tau h \sum_{j=1}^{M-1} \text{Im} \left(f_{jk} \bar{\Phi}_{jk} \right), \quad k = \overline{1, N} \quad (3.1.2.3)$$

Burada

$$\tau \left(\delta_t \Phi_{jk} \cdot \bar{\Phi}_{jk} + \delta_t \bar{\Phi}_{jk} \cdot \Phi_{jk} \right) = \left| \bar{\Phi}_{jk} \right|^2 - \left| \Phi_{jk-1} \right|^2 - \left| \Phi_{jk} - \Phi_{jk-1} \right|^2 \quad (3.1.2.4)$$

eşitliğini kullanırsak kolaylıkla aşağıdaki eşitsizliği elde ederiz.

$$h \sum_{j=1}^{M-1} \left(\left| \Phi_{jk} \right|^2 - \left| \Phi_{jk-1} \right|^2 \right) \leq 2\tau h \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jk} \right| \left| \Phi_{jk} \right|$$

Bu eşitsizliğin her iki tarafını N üzerinden 1'den m 'e kadar ($m \leq N$) toplamış olursak ve (3.1.1.12) şartını kullanırsak $\forall m \in \{1, 2, \dots, N\}$ için

$$h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \Phi_{jm} \right|^2 \leq h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \varphi_j \right|^2 + 2\tau h \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jk} \right| \left| \Phi_{jk} \right| \quad (3.1.2.5)$$

eşitsizliğinin geçerli olduğunu elde edebiliriz. Bu eşitsizliğin sağ tarafında olan m 'nci terimi ayırılım ve ε -Cauchy eşitsizliğini kullanalım. Bu taktirde herhangi $m \in \{1, 2, \dots, N\}$ için

$$h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \Phi_{jm} \right|^2 \leq h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \varphi_j \right|^2 + \varepsilon \tau h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \Phi_{jm} \right|^2 + \frac{\tau}{\varepsilon} h \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jm} \right|^2 + 2\tau h \sum_{k=1}^{M-1} \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jk} \right| \left| \Phi_{jk} \right|$$

eşitsizliği elde edilir. Burada $\varepsilon = \frac{1}{2\tau}$ alırsak kolaylıkla aşağıdaki eşitsizliği elde edebiliriz.

$$h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \Phi_{jm} \right|^2 \leq 2h \sum_{j=1}^{M-1} \left| \varphi_j \right|^2 + 4T\tau h \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jm} \right|^2 + 4\tau h \sum_{k=1}^{M-1} \sum_{j=1}^{M-1} \left| f_{jk} \right| \left| \Phi_{jk} \right|, \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\}$$

Bu eşitsizliğin sağ tarafındaki 3. terime Cauchy-Bunyakovskii eşitsizliği uygularsak

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |\Phi_{jm}|^2 \leq 2\tau h \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{j=1}^{M-1} |\Phi_{jk}|^2 + 2h \sum_{j=1}^{M-1} |\varphi_j|^2 + (2+4T)\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |f_{jk}|^2$$

eşitsizliği elde edilir. Bu eşitsizliğe Gronwall Lemasının diskret aynısını [4] uygularsak, kolaylıkla aşağıdaki kestirimin geçerli olduğu elde edilir.

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |\Phi_{jm}|^2 \leq c_1 \left(h \sum_{j=1}^{M-1} |\varphi_j|^2 + \tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |f_{jk}|^2 \right), \forall m \in \{1, 2, \dots, N\}$$

Burada $c_1 > 0$ sayısı m , τ ve h 'den bağımsızdır. Teorem 3.1.2.1 ispatlandı.

3.1.3. Fark Şemasının Hatası İçin Kestirim

Bu alt bölümde fark şemalarının hatası için kestirimleri elde edeceğiz. Bu amaçla önce (3.1.1.11) – (3.1.1.13) şemasını ele alacağız. $\psi(x, t)$ (3.1.1.1) – (3.1.1.3) sınır değer probleminin çözümü olsun. ψ_{jk} ağ fonksiyonu ise $\psi(x, t)$ fonksiyonuna karşılık gelen ve aşağıdaki gibi tanımlanan ağ fonksiyonu olsun:

$$\begin{aligned} [\psi(x, t)] &= \{\psi_{jk}\}, \psi_{jk} = \frac{1}{h} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \psi(x, t_k) \partial x, \\ j &= \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N}, \\ \psi_{j_0} &= \varphi_j, j = \overline{0, M}, \varphi_0 = \varphi_M = 0, \psi_{0k} = \psi_{Mk} = 0, k = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (3.1.3.1)$$

ile (3.1.1.11) – (3.1.1.13) fark şemasının hatasını göstereyim. Açıktaır ki $Z_{jk} = \phi_{jk} - \psi_{jk}$ ağ fonksiyonu aşağıdaki sistemi sağlar:

$$\begin{aligned} i\delta_t Z_{jk} + a_0 \delta_{xx} Z_{jk} - a^j Z_{jk} + V_k Z_{jk} &= F_{jk}, \\ j &= \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N}, \end{aligned} \quad (3.1.3.2)$$

$$Z_{j_0} = 0, j = \overline{0, M}. \quad (3.1.3.3)$$

$$Z_{0k} = Z_{mk} = 0, k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.4)$$

Burada F_{jk} ağ fonksiyonu aşağıdaki formül ile tanımlanır:

$$\begin{aligned} F_{jk} &= \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left(i \frac{\partial \psi}{\partial t} + a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a_1(x) \psi + V(t) \psi \right) dx dt - \\ & i\delta_t \psi_{jk} - a_0 \delta_{xx} \psi_{jk} + a^j \psi_{jk} - V_k \psi_{jk}, \\ j &= \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (3.1.3.5)$$

Teorem 3.1.3.1 : Farz edelim ki; Teorem 3.1.2.1 şartlar sağlansın ve τ, h adımları

$c_3 \leq \frac{\tau}{h^2} \leq c_4$ şartları sağlansın. Burada $c_3 > 0, c_4 > 0$ sayıları τ ve h 'den

bağımsızdır. Bu taktirde aşağıdaki eşitsizlik geçerlidir:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |Z_{jm}|^2 \leq c_5 (\tau + h) , \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (3.1.3.6)$$

Burada $c_5 > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

İspat : (3.1.3.2) – (3.1.3.4) sisteminin her bir $t = t_k$ için aşağıdaki toplam özdeşliğine denk olması açıktır:

$$\begin{aligned} & h \sum_{j=1}^{M-1} i \delta_t Z_{jk} \bar{\eta}_{jk} - a_0 h \sum_{j=1}^{M-1} i \delta_x Z_{jk} \bar{\eta}_{jk} - h \sum_{j=1}^{M-1} a^j Z_{jk} \bar{\eta}_{jk} + \\ & + h \sum_{j=1}^{M-1} V_k Z_{jk} \bar{\eta}_{jk} = h \sum_{j=1}^{M-1} F_{jk} \bar{\eta}_{jk} , \quad k = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (3.1.3.7)$$

Burada η_{jk} herhangi ağ fonksiyonu olup $\eta_{0k} = \eta_{Mk} = 0$, $k = \overline{1, N}$ şartlarını sağlar.

Bu özellikte $\bar{\eta}_{jk}$ 'nin yerine $\tau \bar{Z}_{jk}$ alıp oradan kolaylıkla teorem 3.1.2.1 'in ispatında olduğu gibi aşağıdaki kestirimi elde ederiz:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |Z_{jm}|^2 \leq c_6 \tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |f_{jk}|^2 , \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (3.1.3.8)$$

Burada $c_6 > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

Şimdi f_{jk} ağ fonksiyonunu aşağıdaki gibi gösterelim:

$$F_{jk} = F_{jk}^1 + F_{jk}^2 + F_{jk}^3 + F_{jk}^4 , \quad j = \overline{1, M-1} , \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.9)$$

Burada

$$F_{jk}^1 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} i \frac{\partial \psi}{\partial t} dx dt - i \delta_t \psi_{jk} , \quad (3.1.3.10)$$

$$F_{jk}^2 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt - a_0 \delta_{xx} \psi_{jk} , \quad (3.1.3.11)$$

$$F_{jk}^3 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} a(x) \psi(x,t) dx dt + a^j \psi_{jk} , \quad (3.1.3.12)$$

$$j = \overline{1, M-1} , k = \overline{1, N} ,$$

$$F_{jk}^4 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} V(t) \psi(x,t) dx dt - V_k \psi_{jk} . \quad (3.1.3.13)$$

olarak sonuçlanır.

Şimdi bu terimlerin her birini değerlendirelim. ψ_{jk} için olan (3.1.3.1) formülünü kullanırsak F_{jk}^1 için aşağıdaki eşitliği elde ederiz:

$$F_{jk}^1 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} i \frac{\partial \psi}{\partial t} dx dt - i \delta_t \psi_{jk} = \frac{i}{\tau h} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t_{k-1})) dx - \frac{1}{\tau} \left[\frac{1}{h} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \psi(x, t_k) dx - \frac{1}{h} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \psi(x, t_{k-1}) dx \right] = 0, j = \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N} \quad (3.1.3.14)$$

F_{jk}^3 terimi değerlendirmek için (3.1.3.12) formülünü kullanırsak

$j = \overline{1, M-1} , k = \overline{1, N}$ için

$$F_{jk}^3 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} (a^j - a(x)) \psi_{jk} dx dt + \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} a(x) (\psi_{jk} - \psi(x,t)) dx dt \quad (3.1.3.15)$$

elde edilir. Burada a^j için olan formülü göz önüne alırsak, $j = \overline{1, M-1} , k = \overline{1, N}$ için

$$|F_{jk}^3| \leq \frac{\mu_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} |\psi_{jk} - \psi(x,t)| dx dt \quad (3.1.3.16)$$

elde edilir.

Şimdi $\psi_{jk} - \psi(x, t)$ farkını değerlendirelim. Bu amaçla ψ_{jk} için olan (3.1.3.1) formülünü kullanırsak $j = \overline{1, M-1}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$\begin{aligned} \psi_{jk} - \psi(x, t) &= \frac{1}{h} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} (\psi(\xi, t_k) - \psi(\xi, t) + \psi(\xi, t) + \psi(x, t)) d\xi \\ &= \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left[\int_t^{t_k} \frac{\partial \psi(\xi, \theta)}{\partial \theta} d\theta + \int_x^\xi \frac{\partial \psi(\eta, t)}{\partial \eta} d\eta \right] d\xi, \end{aligned} \quad (3.1.3.17)$$

eşitsizliğini elde ederiz. Bu eşitsizliği (3.1.3.16) 'nın sağ tarafında kullanalım. Bu taktirde aşağıdaki eşitsizliği kolaylıkla elde edebiliriz:

$$\begin{aligned} |F_{jk}^3| &\leq \frac{\mu_0}{\tau h^2} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left[\int_t^{t_k} \left| \frac{\partial \psi(t, \theta)}{\partial \theta} \right| d\theta + \int_x^t \left| \frac{\partial \psi(\eta, t)}{\partial \eta} \right| d\eta \right] d\xi dx dt, \\ j &= \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N} \end{aligned}$$

Burada Cauchy-Bunyakovskii eşitliğini uygularsak, $j = \overline{1, M-1}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$\begin{aligned} |F_{jk}^2| &\leq 2\mu_0 \frac{\tau}{h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \right|^2 dx dt + \\ &+ 2\mu_0 \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx dt \end{aligned} \quad (3.1.3.18)$$

eşitsizliğinin geçerli olduğunu elde ederiz. Şimdi F_{jk}^2 terimini değerlendirelim.

Bu amaçla $j = \overline{2, M-2}$, $k = \overline{1, N}$ için F_{jk}^2 terimini (3.1.3.11) formülünü

kullanarak $j = \overline{2, M-2}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$\begin{aligned}
F_{jk}^{22} &= \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt - a_0 \delta_{xx} \psi_{jk} = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt - \\
&\frac{a_0}{h^3} \left[\int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t_k) dx - 2 \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t_k) dx + \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t_k) dx \right] = \\
&\frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt - \frac{a_0}{\tau h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt - 2 \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt \right. \\
&\left. + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt \right] - \frac{a_0}{\tau h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \left(\int_t^{t_k} \int_x \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi d\theta - \right. \right. \\
&\left. \left. - \int_t^x \int_{x-h}^x \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi d\theta \right) dx dt \right] = F_{jk}^{21} - F_{jk}^{22}, \tag{3.1.3.19}
\end{aligned}$$

elde edilir. Burada $j = \overline{2, M-2}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$\begin{aligned}
F_{jk}^{21} &= \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx dt - \frac{a_0}{\tau h} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt - \right. \\
&\left. - 2 \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx dt \right], \tag{3.1.3.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{jk}^{22} &= \frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \int_t^{t_k} \int_x \left(\frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} - \frac{\partial^2 \psi(\xi-h, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} \right) d\xi dx dt, \\
j &= \overline{2, M-2}, k = \overline{1, N} \tag{3.1.3.21}
\end{aligned}$$

elde edilir. Sonucu formülü kullandığımızda, $j = \overline{2, M-2}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$\begin{aligned}
|F_{jk}^{22}|^2 &\leq \frac{2a_0^2 \tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 \psi(x-h, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right. \\
&\left. + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 \psi(x-h, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right] \tag{3.1.3.22}
\end{aligned}$$

eşitsizliğini kolaylıkla elde edebiliriz.

Şimdi F_{jk}^{21} terimini değerlendirelim. (3.1.3.20) formülünü kullanarak aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$F_{jk}^{21} = \frac{a_0}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{1}{h} \left(\frac{\partial \psi(x_j + h/2, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi(x_j - h/2, t)}{\partial x} \right) - \frac{1}{h^3} \left[\int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx - \right. \right. \\ \left. \left. - 2 \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \psi(x, t) dx + \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j-1}+h/2} \psi(x, t) dx + \right] \right\} dt, \quad j = \overline{2, M-2}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.23)$$

$$P_t(\psi) = \frac{1}{h} \left(\frac{\partial \psi(x_j + h/2, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi(x_j - h/2, t)}{\partial x} \right) - \frac{1}{h^3} \left[\int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x, t) dx - \right. \\ \left. - 2 \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \psi(x, t) dx + \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j-1}+h/2} \psi(x, t) dx \right], \quad \forall t \in [0, T] \quad (3.1.3.24)$$

olsun. Bu gösterim ψ 'ye göre her bir $t \in [0, T]$ için bir fonksiyondür. Bu gösterimde x_j 'yi x ile, x 'i ξ ile deęiřtirelim ve $\xi = x - sh$ deęiřken dönüşümünü kullanalım. Bu taktirde $P_t(\psi)$ fonksiyoneli ařaęıdaki gibi yazılabilir:

$$P_1(\tilde{\psi}) = \frac{1}{h^2} \left[\left(\frac{\partial \tilde{\psi}(0,5, t)}{\partial s} - \frac{\partial \tilde{\psi}(-0,5, t)}{\partial s} \right) - \int_{0,5}^{1,5} \tilde{\psi}(s, t) ds + \right. \\ \left. + 2 \int_{-0,5}^{0,5} \tilde{\psi}(s, t) ds - \int_{-1,5}^{-0,5} \tilde{\psi}(s, t) ds \right]. \quad (3.1.3.25)$$

Burada $\tilde{\psi}(s, t) = \psi(x + sh, t)$ dir. Formülden gözüktüęü gibi $P_t(\tilde{\psi})$ fonksiyoneli $\tilde{\psi}$ 'ya göre lineerdir. Bunun yanı sıra $P_t(\tilde{\psi})$ fonksiyoneli t tespit edildięinde $W_2^3(-0,5, 0,5)$ uzayında sınırlıdır. Gerçekten $\forall t \in [0, T]$ için $\psi(x, t)$ fonksiyonu (3.1.1.5) – (3.1.1.10) kestirimine göre $W_2^3(x_j - h/2, x_j + h/2)$ uzayında olur. Bu nedenle $\forall t \in [0, T]$ için $\tilde{\psi}(s, t)$ fonksiyonu da $W_2^3(-0,5, 0,5)$ uzayında olacaktır. (3.1.3.25) formülünü kullanırsak

$$|P_t(\tilde{\psi})| \leq c_7 h^{-2} \|\tilde{\psi}\|_{W_2^3(-0,5, 0,5)}, \quad \forall t \in [0, T] \quad (3.1.3.26)$$

eřitsizlięini kolaylıkla elde ederiz. Burada $c_7 > 0$ sayısı τ ve h 'den baęımsızdır. Bu eřitsizlięin yanı sıra $P_t(\tilde{\psi})$ fonksiyonelinin $\tilde{\psi} = as^2 + bs + c$

polinomu için sıfıra dönüştüğünü gösterelim. Gerçekten $\tilde{\psi} = as^2 + bs + c$ polinomunu (3.1.3.25) formülünde yerine yazarsak aşağıdaki eşitliği elde ederiz:

$$\begin{aligned}
P_t(\tilde{\psi}) &= \frac{1}{h^2} \left[(2a(0,5) + b) - (2a(-0,5) + b) \right] - \\
&\quad \left[\left(\frac{a(1,5)^3}{3} + \frac{b(1,5)^2}{2} + c(1,5) \right) - \left(\frac{a(0,5)^3}{3} + \frac{b(0,5)^2}{2} + c(0,5) \right) \right] + \\
&\quad \left[\left(\frac{a(0,5)^3}{3} + \frac{b(0,5)^2}{2} + c(0,5) \right) - \left(\frac{a(-0,5)^3}{3} + \frac{b(-0,5)^2}{2} + c(-0,5) \right) \right] - \\
&\quad \left[\left(\frac{a(-0,5)^3}{3} + \frac{b(-0,5)^2}{2} + c(-0,5) \right) - \left(\frac{a(-1,5)^3}{3} + \frac{b(-1,5)^2}{2} + c(-1,5) \right) \right] \\
&= \frac{1}{h^2} (2a - 16(0,5)^3 a) = \frac{1}{h^2} (2a - 2a) = 0, \quad \forall t \in [0, T]. \tag{3.1.3.27}
\end{aligned}$$

Böylece $P_t(\tilde{\psi})$ fonksiyoneli için t tespit edildiğinde [10] çalışmalarında bildiğimiz Bramble – Hilbert lemmasının şartlarının sağlandığını görüyoruz. Bu nedenle bu lemmanın hükmünü ve (3.1.3.26) eşitsizliğini kullanarak $\forall t \in [t_{k-1}, t_k], k = \overline{1, N}$ için aşağıdaki eşitsizliği elde ederiz:

$$|P_t(\tilde{\psi})| \leq c_8 h^{-2} \left\| \frac{\partial^3 \tilde{\psi}(\cdot, t)}{\partial s^3} \right\|_{L_2(-0,5, 0,5)}, \quad \forall t \in [t_{k-1}, t_k], k = \overline{1, N}. \tag{3.1.3.28}$$

Burada $c_8 > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. Bu eşitsizlikte eski değişkenlere geri dönersek (3.1.2.23) – (3.1.2.24) eşitlikleri yardımıyla

$$|F_{jk}^{21}| \leq c_8 a_0 h^{\frac{1}{2}} \tau^{-\frac{1}{2}} \left(\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} \left| \frac{\partial^3 \psi(x, t)}{\partial x^3} \right|^2 dx dt \right)^{\frac{1}{2}}, \tag{3.1.3.29}$$

$$j = \overline{2, M-2}, k = \overline{1, N}$$

Şimdi $j=1$ için F_{jk}^2 terimini kestirelim. Bu amaçla F_{jk}^2 için olan formülü kullanırsak aşağıdaki eşitliği yazabiliriz:

$$F_{1k}^2 = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt - a_0 \delta_{xx} \psi_{jk} = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx dt -$$

$$- \frac{a_0}{h^2} \left[\frac{1}{h} \int_{x_2-h/2}^{x_2+h/2} \psi(x, t_k) dx - \frac{2}{h} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t_k) dx - \psi_{0k} \right], \quad k = \overline{1, N}$$

Burada tanıma göre $\psi_{0k} = 0$, $k = \overline{1, N}$ dir. Bu nedenle ψ_{0k} 'nın yerine $\psi(x_1 - h/2, t_k)$, $k = \overline{1, N}$ alalım. Bu taktirde F_{1k}^1 için formülü aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$F_{1k}^2 = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^2} \left[\int_{x_2-h/2}^{x_2+h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t) dx \right] \right\} -$$

$$- \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{\partial \psi(x_1 - h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^2} \left[\int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x_1 - h/2, t) dx \right] \right\} dt$$

$$- \frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx - 2 \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx \right.$$

$$\left. + \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} (\psi(x_1 - h/2, t_k) - \psi(x_1 - h/2, t)) dx \right\} dt = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} \right.$$

$$\left. - \frac{1}{h^2} \left[\int_{x_2-h/2}^{x_2+h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t) dx \right] \right\} dt$$

$$- \frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \int_t^{x+h} \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi - \int_{x_1-h/2}^x \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi \Big] d\theta dx dt$$

$$+ \frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \int_{x_1-h/2}^{x_1} \int_{x_1-h/2}^{\xi} \frac{\partial^2 \psi(\eta, t)}{\partial \eta^2} d\eta d\xi dx dt =$$

$$= F_{1k}^{21} + F_{1k}^{22} + F_{1k}^{23}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.30)$$

Burada

$$F_{1k}^{21} = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^2} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \psi(x, t) dx \right] \right\} dt, k = \overline{1, N}, \quad (3.1.3.31)$$

$$F_{1k}^{22} = \frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \int_t^{x+h} \left[\int_x^{x+h} \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi - \int_{x_1 - h/2}^x \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi \right] d\theta dx dt, \quad (3.1.3.32)$$

$$k = \overline{1, N},$$

$$F_{1k}^{23} = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \int_{x_1 - h/2}^{x_1} \int_{x_1 - h/2}^{\xi} \frac{\partial^2 \psi(\eta, t)}{\partial \eta^2} d\eta d\xi dx dt, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.33)$$

dır.

Şimdi önce F_{1k}^{22} ve F_{1k}^{23} terimlerini değerlendirelim. Bu terimler için olan (3.1.3.32) ve (3.1.3.33) formüllerini Cauchy-Bunyakovskii eşitsizliğini kullanarak kolaylıkla aşağıdaki eşitsizlikleri elde edebiliriz:

$$|F_{1k}^{22}|^2 \leq 8a_0^2 \frac{\tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right], k = \overline{1, N}, \quad (3.1.3.34)$$

$$|F_{1k}^{23}|^2 \leq \frac{a_0^2}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right|^2 dx dt, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.35)$$

Sonuncu eşitsizlikte $\forall t \in [0, T]$ için

$$\left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right|^2 \leq c_9 \left(\left\| \frac{\partial^2 \psi(\cdot, t)}{\partial x^2} \right\|_{L_2(0, \ell)}^2 + \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(0, \ell)}^2 \right) \quad (3.1.3.36)$$

eşitsizliğini kullanırsak kolaylıkla aşağıdaki eşitsizliği elde edebiliriz:

$$|F_{1k}^{23}|^2 \leq c_{10} \frac{a_0^2}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\left\| \frac{\partial^2 \psi(\cdot, t)}{\partial x^2} \right\|_{L_2(0, \ell)}^2 + \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(0, \ell)}^2 \right) dt, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.1.3.37)$$

Burada $c_{10} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. Şimdi F_{1k}^{21} terimini değerlendirelim. Bu amaçla F_{1k}^{21} terimini aşağıdaki gibi yazalım:

$$F_{1k}^{21} = \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} P_t(\psi) dt. \quad (3.1.3.38)$$

Burada

$$P_t^0(\psi) = \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^2} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \psi(x, t) dx \right], \quad t \in [t_{k-1}, t_k] \quad (3.1.3.39)$$

olsun. (3.1.3.29) eşitsizliğinin elde edilmesine benzer olarak $P_t^0(\psi)$ fonksiyoneli için Bramble – Hilbert lemmasını uygularsak ,

$$|P_t^0(\psi)| \leq c_{11} h^{1/2} \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(x_1 - h/2, x_1 + h/2)}^2, \quad (3.1.3.40)$$

$$\forall t \in [t_{k-1}, t_k], \quad k = \overline{1, N}$$

olup (3.1.3.38) de dikkate alırsak

$$|F_{1k}^{21}| \leq c_{11} \frac{a_0 h^{1/2}}{\tau^{1/2}} \left(\int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(x_1 - h/2, x_1 + h/2)}^2 dt \right)^{1/2}$$

eşitsizliği elde edilir. Buradan da

$$|F_{1k}^{21}|^2 \leq c_{12} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi(x, t)}{\partial x^3} \right|^2 dx dt, \quad k = \overline{1, N} \quad (3.1.3.41)$$

elde edilir. Burada $c_{12} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. (3.1.3.34) , (3.1.3.37) ve (3.1.3.41) eşitsizliklerini kullanarak F_{1k}^{21} terimi için (3.1.3.30)'den aşağıdaki eşitsizliği elde ederiz:

$$\begin{aligned}
|F_{1k}^2|^2 &\leq c_{13} \frac{\tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_2-h/2}^{x_2+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right] + \\
&+ c_{14} \tau^{-1} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\left\| \frac{\partial^2 \psi(\cdot, t)}{\partial x^2} \right\|_{L_2(0,\ell)}^2 + \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(0,\ell)}^2 \right) dt + \\
&+ c_{15} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right|^2 dx dt \quad , \quad k = \overline{1, N}
\end{aligned} \tag{3.1.3.42}$$

Burada $c_{13} > 0, c_{14} > 0, c_{15} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. Aynı biçimde F_{M-1K}^2 terimi için de aşağıdaki eşitsizliği ispatlayabiliriz:

$$\begin{aligned}
|F_{M-1K}^2|^2 &\leq c_{16} \frac{\tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{M-1}-h/2}^{x_{M-1}+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \right|^2 dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{M-1}-h/2}^{x_{M-1}+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \right|^2 dx dt \right] + \\
&+ c_{17} \tau^{-1} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\left\| \frac{\partial^2 \psi(\cdot, t)}{\partial x^2} \right\|_{L_2(0,\ell)}^2 + \left\| \frac{\partial^3 \psi(\cdot, t)}{\partial x^3} \right\|_{L_2(0,\ell)}^2 \right) dt + \\
&+ c_{18} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{M-1}-h/2}^{x_{M-1}+h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right|^2 dx dt \quad , \quad k = \overline{1, N}.
\end{aligned} \tag{3.1.3.43}$$

Burada $c_{16} > 0, c_{17} > 0, c_{18} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

Böylece τ ve h adımları için uyum şartını (3.1.3.22) , (3.1.3.29) , (3.1.3.42) ve (3.1.3.43) eşitsizliklerini ve (3.1.1.9) , (3.1.1.10) ve (3.1.3.4) kestirimini kullanarak F_{jk}^2 terimi için de aşağıdaki eşitsizliği ispatlamış oluruz:

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^2|^2 \leq c_{19} (\tau + h) \tag{3.1.3.44}$$

burada $c_{19} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. (3.1.3.18) eşitsizliğini ve ve (3.1.1.9) , (3.1.1.10) ve (3.1.3.4) kestirimini kullanarak F_{jk}^3 terimi için aşağıdaki bağlantıyı elde ediyoruz:

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^3|^3 \leq c_{20} (\tau^2 + h^2) \tag{3.1.3.45}$$

burada $c_{20} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

$$\begin{aligned}
F_{jk}^4 &= \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} V(t) \varphi(x,t) dxdt - V_k \psi_{jk} = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} (V(t) \psi(x,t) - V_k \psi_{jk}) dxdt \\
&= \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} (V(t) - V_k) \psi_{jk} dxdt + \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} V(t) (\psi(x,t) - \psi_{jk}) dxdt = \\
&= \frac{\psi_{jk}}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} (V(t) - V_k) dxdt + \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} V(t) (\psi(x,t) - \psi_{jk}) dxdt \\
&= \frac{1}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} (V(t) - V_k) dt = 0
\end{aligned}$$

olduğundan

$$F_{jk}^4 = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} V(t) (\psi(x,t) - \psi_{jk}) dxdt \quad (3.1.3.46)$$

olup

$$|F_{jk}^4| \leq \frac{b_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} |\psi(x,t) - \psi_{jk}| dxdt$$

eşitsizliğini elde ederiz. Burada (3.1.3.17) 'den yararlanarak (3.1.3.18) elde edilmiştir. Benzer şekilde aşağıdaki eşitsizliği yazabiliriz:

$$\begin{aligned}
|F_{jk}^4| &\leq 2b_0 \frac{\tau}{h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \left| \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \right|^2 dxdt + 2b_0 \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \left| \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \right|^2 dxdt \\
& \quad j = \overline{1, M-1} \quad , \quad k = \overline{1, N}.
\end{aligned} \quad (3.1.3.47)$$

$F_{jk}^1 = 0$ olduğunu ve (3.1.3.44) , (3.2.3.45) , (3.1.3.47) eşitsizlikleri dikkate alınarak (3.1.3.9) eşitliğinin ve (3.1.3.8) kestiriminin yardımıyla aşağıdaki kestirimi elde ederiz:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |Z_{jm}|^2 \leq c_{21} (\tau + h) \quad , \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\}$$

Burada $c_{21} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır. Burada c_{21} 'i c_5 ile gösterirsek, teoremin ispatlanmış olduğunu elde ederiz. Böylece Teorem 3.1.3.1 ispatlandı.

3.2. Schrödinger Denklemi İçin 2.çeşit Başlangıç Sınır Değer Probleminin Nümerik Çözümü

Bu bölümde Schrödinger denklemi için 2.çeşit başlangıç sınır değer probleminin fark şeması oluşturulacak, fark şeması için kararlılık kestirimi elde edilecek ve sonlu fark yaklaşımı için yakınsama hızı gösterilecektir.

Bu bölüm iki alt bölümden oluşmaktadır.

3.2.1. Başlangıç Sınır Değer Probleminin Formülize Edilmesi ve Fark Şemasının Oluşturulması

Bu alt bölümde ele alınan Schrödinger denklemi için 2.çeşit başlangıç sınır değer problemini tanımlayalım.

$\ell > 0, T > 0$ verilen sayılar $0 \leq x < \ell, \quad 0 \leq t \leq T, \quad \Omega_t = (0, \ell) \times (0, t), \quad \Omega = \Omega_t$ olsun.

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a(x)\psi + V(t)\psi = f(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \quad (3.2.1.1)$$

denkleminin

$$\psi(x, 0) = \varphi(x), \quad x \in (0, \ell) \quad (3.2.1.2)$$

başlangıç değer ve

$$\frac{\partial \psi(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial \psi(\ell, t)}{\partial x} = 0, \quad t \in (0, T) \quad (3.2.1.3)$$

sınır değer şartları altında çözümünün bulunması problemini ele alalım. Burada $a_0 > 0$ verilen sayı, $a(x), V(t)$ fonksiyonları ölçülebilir reel değerli olup

$$\mu_0 \leq a(x) \leq \mu_1, \quad \left| \frac{da(x)}{dx} \right| \leq \mu_1, \quad (3.2.1.4)$$

$$\forall x \in (0, \ell), \quad \mu_0, \mu_1 = \text{sabit} > 0$$

$$|V(t)| \leq b_0, \quad \left| \frac{dV(t)}{dt} \right| \leq b_1, \quad b_0, b_1 = \text{sabit} > 0 \quad (3.2.1.5)$$

şartları sağlar.

$\varphi(x)$, $f(x,t)$ fonksiyonları ölçülebilir kompleks değerli olup

$$\varphi \in W_2^3(0, \ell), \varphi'(0) = \varphi'(\ell) = 0, \quad (3.2.1.6)$$

$$f, \frac{\partial f}{\partial x} \in W_2^{0,1}(\Omega), \quad (3.2.1.7)$$

şartlarını sağlar ve burada

$$L\varphi = -a_0 \frac{d^2\varphi}{dx^2} + a(x)\varphi \quad (3.2.1.8)$$

biçimindedir.

Tanım 3.2.1.1 : (3.2.1.1) – (3.2.1.3) başlangıç sınır değer probleminin çözümü olarak $W_2^{2,1}(\Omega)$ uzayına ait olan (3.2.1.1) denklemi $\forall (x,t) \in \Omega$ için, (3.2.1.2) başlangıç şartını $\forall x \in (0, \ell)$ için ve (3.2.1.3) sınır değer şartlarını $\forall t \in (0, T)$ için sağlayan $\psi = \psi(x,t)$ fonksiyonu anlaşılır.

Söylemek gerekir ki (3.2.1.1) – (3.2.1.3) başlangıç sınır değer problemi daha önce [4, 15] çalışmalarında incelenmiş ve bu çalışmalar sonucunda belirtilmiştir ki

başlangıç sınır değer probleminin $W_2^{2,1}(\Omega)$ uzayına ait olan bir tek çözümü vardır ve bu çözümü için aşağıdaki kestirim geçerlidir:

$$\|\psi\|_{W_2^{2,1}(\Omega)} \leq c_0 \left(\|\varphi\|_{W_2^2(0,\ell)} + \|f\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} \right). \quad (3.2.1.9)$$

Burada $c_0 > 0$ sabiti φ ve f den bağımsızdır. Problemin verileri yeteri kadar düzgün olduğundan yani (3.2.1.4) – (3.2.1.7) şartları sağlandığından başlangıç sınır değer probleminin düzgün çözümleri de çalışılmış, incelenmiş ve çözüm için (3.2.1.9) ve yanı sıra aşağıdaki kestirim elde edilmiştir:

$$\left\| \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right\|_{L_2(\Omega)} + \left\| \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t} \right\|_{L_2(\Omega)} \leq c_1 \left(\|\varphi\|_{W_2^3(0,\ell)} + \|f\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} + \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|_{W_2^{0,1}(\Omega)} \right) \quad (3.2.1.10)$$

Burada $c_1 > 0$ sabiti φ ve f den bağımsızdır.

Şimdi (3.2.1.1) – (3.2.1.3) problemine karşılık gelen farklar şemasını oluşturmaya çalışalım. Bu amaçla ilk önce $\bar{\Omega} = [0, \ell] \times [0, T]$ bölgesini ağa dönüştürelim.

Farz edelim ki h ile x değişkenine göre adım, τ ile t değişkenine göre adım gösterilsin.

$$\{(x_j, t_k)\}, \quad x_j = jh - \frac{h}{2}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad x_0 = x_1 - \frac{h}{2} = 0, \quad x_M = x_{M-1} + \frac{h}{2} = \ell$$

$$t_k = k\tau, \quad k = \overline{0, N}, \quad h = \frac{\ell}{M-1}, \quad \tau = \frac{T}{N}$$

Burada $M > 0$, $N > 0$ verilen tamsayılardır.

$$\delta_t \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{jk-1}}{\tau}$$

$$\delta_x^- \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{j-1k}}{h}, \quad \delta_x \Phi_{1k} = \frac{2(\Phi_{1k} - \Phi_{0k})}{h}$$

$$\delta_x \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - \Phi_{jk}}{h}, \quad \delta_x \Phi_{M-1k} = \frac{2(\Phi_{Mk} - \Phi_{M-1k})}{h}$$

$$\delta_{xx} \Phi_{jk} = \frac{\Phi_{j+1k} - 2\Phi_{jk} + \Phi_{j-1k}}{h} = \frac{\delta_x \Phi_{jk} - \delta_x \Phi_{jk}}{h}$$

gösterimlerini yapalım. Burada $\Phi_{jk} = \Phi(x_j, t_k)$ fonksiyonu $\{(x_j, t_k)\}$ ağında tanımlanan ağ fonksiyonudur.

3.1.1 alt bölümünde olduğu gibi (3.2.1.1) – (3.2.1.3) sınır değer probleminin sonlu fark şemasını aşağıdaki biçimde yazabiliriz:

$$i\delta_t \Phi_{jk} + a_0 \delta_{xx}^- \Phi_{jk} - a^j \Phi_{jk} + V_k \Phi_{jk} = f_{jk}, \quad (3.2.1.11)$$

$$j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N},$$

$$\Phi_{j0} = \varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad (3.2.1.12)$$

$$\delta_x \Phi_{1k} = \delta_x \Phi_{Mk} = 0, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.2.1.13)$$

Burada a^j , φ_j , f_{jk} , V_k ağ fonksiyonları olup aşağıdaki formüllerle tanımlanır:

$$a^j = \frac{1}{h} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} a(x) dx, \quad j = \overline{1, M-1} \quad (3.2.1.14)$$

$$\varphi_j = \frac{1}{h} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} \varphi(x) dx, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad (3.2.1.15)$$

$$\varphi_1 = \varphi_0, \quad \varphi_M = \varphi_{M-1},$$

$$f_{jk} = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - \frac{h}{2}}^{x_j + \frac{h}{2}} f(x, t) dx dt, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N} \quad (3.2.1.16)$$

$$V_k = \frac{1}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} V(t) dt, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.2.1.17)$$

3.2.2. Fark Şemasının Kararlılık ve Hata Kestirimleri

Bu alt bölümde (3.2.1.11) – (3.2.1.13) fark şemasının çözümü için kararlılık kestirimi elde edeceğiz ve bu kestirimi kullanarak fark şemasının hatasını değerlendireceğiz. Bu amaçla ilk önce fark şemasının kararlılık kestirimini gösteren hükmü verelim.

Teorem 3.2.2.1 : Farz edelim ki; $a(x), V(t), \varphi(x), f(x, t)$ fonksiyonları (3.2.1.4) – (3.2.1.8) şartını sağlasın. Bu taktirde (3.2.1.11) – (3.2.1.13) fark şemasının çözümü için aşağıdaki kestirim geçerlidir:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |\Phi_{jm}|^2 \leq c_2 \left(h \sum_{j=1}^{M-1} |\varphi_j|^2 + \tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |f_{jk}|^2 \right), \quad (3.2.2.1)$$

$$\forall m \in \{1, 2, \dots, N\}.$$

Burada $c_2 > 0$ sayısı m, τ ve h 'dan bağımsızdır.

İspat : 3.2.2.1 teoreminin ispatı 3.1.2.1 teoreminin ispatı ile aynıdır.

Şimdi bu teoremin hükmünü kullanarak fark şemasının hatasını değerlendirmeye çalışalım. Bu amaçla aşağıdaki sistemi göz önüne alalım. Z_{jk} ağ fonksiyonu aşağıdaki fonksiyonu sağlar:

$$i\delta_t Z_{jk} + a_0 \delta_{xx}^- Z_{jk} - a^j Z_{jk} + V_k Z_{jk} = F_{jk}, \quad (3.2.2.2)$$

$$j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N},$$

$$Z_{j0} = 0, \quad j = \overline{0, M}, \quad (3.2.2.3)$$

$$\delta_x Z_{1k} = \delta_x Z_{Mk} = 0, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.2.2.4)$$

Burada F_{jk} ağ fonksiyonu olup;

$$F_{jk} = \frac{1}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left(i \frac{\partial \psi}{\partial t} + a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a_1(x) \psi + V(t) \psi \right) dx dt - \quad (3.2.2.5)$$

$$-i \delta_t \psi_{jk} - a_0 \delta_{xx} \psi_{jk} + a^j \psi_{jk} - V_k \psi_{jk}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}$$

formülü ile hesaplanır. Z_{jk} ağ fonksiyonu (3.2.2.2)-(3.2.2.4) probleminin çözümü olup aşağıdaki biçimde tanımlanır:

$$Z_{jk} = \Phi_{jk} - \psi_{jk}. \quad (3.2.2.6)$$

Burada Φ_{jk} ağ fonksiyonu (3.2.1.11) – (3.2.1.13) fark şemasının çözümü, ψ_{jk} ise (3.2.1.1) – (3.2.1.3) başlangıç sınır değer probleminin çözümünün Steklov anlamında ortalama değeri olup aşağıdaki formüle dayanır:

$$\psi_{jk} = \frac{1}{\tau h} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \psi(x, t_k) dx, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N},$$

$$\psi_{j0} = \varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad (3.2.2.7)$$

$$\psi_{1k} = \psi_{0k} = 0, \quad \psi_M = \psi_{M-1k}, \quad k = \overline{1, N}.$$

Teorem 3.2.2.2: Farz edelim ki; Teorem 3.2.2.1 şartları sağlansın ve τ, h adımları

$c_3 \leq \frac{\tau}{h^2} \leq c_4$ şartları sağlansın. Burada $c_3 > 0, c_4 > 0$ sayıları τ ve h 'den

bağımsızdır. Bu takdirde aşağıdaki eşitsizlik geçerlidir:

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |Z_{jm}|^2 \leq c_{22} (\tau^2 + h^2), \quad \forall m \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (3.2.2.8)$$

Burada $c_{22} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

İspat: Bu teoremin ispatını kısa biçimde yapacağız. Çünkü işlemlerin bazıları teorem 3.1.3.1'de olduğu gibidir. Farklı işlemleri özellikle vurgulayacağız. Teorem 3.1.3.1 ispatında olduğu gibi $\forall m \in \{1, 2, \dots, N\}$ için

$$h \sum_{j=1}^{M-1} |Z_{jm}|^2 \leq c_{23} \tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}|^2, \quad (3.2.2.9)$$

eşitsizliğini elde ederiz. Burada $c_{23} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

Şimdi F_{jk} ağ fonksiyonunu yine

$$F_{jk} = F_{jk}^1 + F_{jk}^2 + F_{jk}^3 + F_{jk}^4, \quad (3.2.2.10)$$

$$j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}$$

biçiminde gösterelim, burada $F_{jk}^1, F_{jk}^2, F_{jk}^3, F_{jk}^4$ terimleri sırasıyla (3.1.3.10), (3.1.3.11), (3.1.3.12) ve (3.1.3.13) formülleri ile tanımlanır. Teorem 3.1.3.1'de olduğu gibi F_{jk}^1 , F_{jk}^3 ve F_{jk}^4 ağ fonksiyonları için aşağıdaki bağıntıları elde edebiliriz:

$$F_{jk}^1 = 0, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N} \quad (3.2.2.11)$$

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^3|^2 \leq C_{24} (\tau^2 + h^2) \quad (3.2.2.12)$$

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^4|^2 \leq C_{25} (\tau^2 + h^2) \quad (3.2.2.13)$$

Burada $c_{24} > 0$, $c_{25} > 0$ sayıları τ ve h 'den bağımsızdır.

$$[\psi(x, t)] = \{ \psi_{jk} \}, \quad \psi_{jk} = \frac{1}{h} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \psi(x, t_k) dx, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}$$

$$\psi_{j0} = \varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad \varphi_0 = \varphi_1, \quad \varphi_M = \varphi_{M-1} \quad (3.2.2.14)$$

$$\delta_x^- \psi_{1k} = \delta_x^- \psi_{Mk} = 0, \quad k = \overline{1, N}$$

olarak tanımlansın.

Şimdi F_{jk}^2 terimini değerlendirelim. (3.1.3.11) formülünü ve (3.2.2.14)'ü kullanırsak F_{jk}^2 için olan formülü aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\begin{aligned}
F_{jk}^2 = & \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_j+h/2} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} dxdt - \frac{a_0}{\tau h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \psi(x,t) dxdt - 2 \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \psi(x,t) dxdt + \right. \\
& \left. + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_{j-1}+h/2} \psi(x,t) dxdt \right] - \frac{a_0}{\tau h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \left(\int_t^{t_k} \int_x^{x+h} \frac{\partial^2 \psi(\xi,\theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi d\theta - \right. \right. \\
& \left. \left. - \int_t^{t_k} \int_{x-h}^x \frac{\partial^2 \psi(\xi,\theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\xi d\theta \right) dxdt \right] = F_{jk}^{21} - F_{jk}^{22}, \quad j = \overline{2, M-2}, \quad k = \overline{1, N}.
\end{aligned} \tag{3.2.2.15}$$

Burada F_{jk}^{21} ve F_{jk}^{22} sırasıyla (3.1.2.20) ve (3.1.3.21) formülleri ile tanımlanmaktadır. Yine teorem 3.1.3.1'in ispatında uygulanan işlemleri yaparsak

F_{jk}^2 için

$$\begin{aligned}
|F_{jk}^2|^2 \leq & \frac{4a_0^2 \tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j+1}-h/2}^{x_{j+1}+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 \psi(x-h,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dxdt + \right. \\
& \left. + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j-h/2}^{x_j+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 \psi(x-h,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dxdt \right] + \\
& + c_{26} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_{j-1}-h/2}^{x_j+h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi(x,t)}{\partial x^3} \right|^2 dxdt, \\
& j = \overline{2, M-2}, \quad k = \overline{1, N}
\end{aligned} \tag{3.2.2.16}$$

eşitsizliğini elde edilir. Burada $c_{26} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

Şimdi $j=1$ için F_{jk}^2 terimini değerlendirelim. Bu amaçla F_{1k}^2 terimini aşağıdaki gibi yazalım:

$$\begin{aligned}
F_{1k}^2 = & \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} dxdt - a_0 \delta_{xx} \psi_{1k} = \\
= & \frac{a_0}{\tau h} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left[\frac{\partial \psi(x_1+h/2, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi(x_1-h/2, t)}{\partial x} \right] dx - \\
& - \frac{a_0}{h^2} \left[\frac{1}{h} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t_k) dx - \frac{2}{h} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \psi(x, t_k) dx + \psi_{0k} \right]
\end{aligned}$$

Burada $\frac{\partial \psi(x_1 - h/2, t)}{\partial x} = \frac{\partial \psi(0, t)}{\partial x} = 0$ olduğunu ve $\psi_{1k} = \psi_{0k}$, $k = \overline{1, N}$ şartlarını

kullanırsak F_{1k}^2 terimini için aşağıdaki formülü elde ederiz:

$$\begin{aligned} F_{1k}^2 &= -\frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx \right] dt + \\ &+ \frac{a_0}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{1}{h} \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^3} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \psi(x, t) dx \right] \right\} dt = (3.2.2.17) \\ &= F_{1k}^{21} + F_{1k}^{22}, \quad k = \overline{1, N}. \end{aligned}$$

Burada $k = \overline{1, N}$ için

$$F_{1k}^{21} = \frac{a_0}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left\{ \frac{1}{h} \frac{\partial \psi(x_1 + h/2, t)}{\partial x} - \frac{1}{h^3} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \psi(x, t) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \psi(x, t) dx \right] \right\} dt, (3.2.2.18)$$

$$F_{1k}^{22} = -\frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left[\int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx - \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} (\psi(x, t_k) - \psi(x, t)) dx \right] dt, (3.2.2.19)$$

elde edilir.

Sonuncu eşitlikten aşağıdaki formülü yazabiliriz:

$$F_{1k}^{22} = -\frac{a_0}{\tau h^3} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \int_x^{x+h} \int_t^{t_k} \frac{\partial^2 \psi(\xi, \theta)}{\partial \xi \partial \theta} d\theta d\xi dx dt, \quad k = \overline{1, N}.$$

Buradan da

$$\begin{aligned} |F_{1k}^{22}|^2 &\leq \frac{2a_0^2 \tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_2 - h/2}^{x_2 + h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt + \right. \\ &\left. + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_j - h/2}^{x_j + h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right], \quad k = \overline{1, N} \end{aligned} (3.2.2.20)$$

elde edilir. F_{1k}^{21} terimini teorem 3.1.3.1'de olduğu gibi değerlendirsek

$$|F_{1k}^{21}|^2 \leq c_{27} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1 - h/2}^{x_1 + h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi(x, t)}{\partial x^3} \right|^2 dx dt, \quad k = \overline{1, N} (3.2.2.21)$$

eşitsizliğini elde edebiliriz. Burada $c_{27} > 0$ sayısı τ ve h 'den bağımsızdır.

Böylece (3.2.2.20) ve (3.2.2.21) eşitsizlikleri yardımıyla (3.2.2.17) eşitsizliğinden aşağıdaki eşitsizliğin geçerli olduğunu elde edebiliriz:

$$\begin{aligned} |F_{1k}^2|^2 &\leq c_{28} \frac{\tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_2+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right] + \\ &+ c_{29} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi(x,t)}{\partial x^3} \right|^2 dx dt, \quad k = \overline{1, N}. \end{aligned} \quad (3.2.2.22)$$

Burada $c_{28} > 0$, $c_{29} > 0$ sayıları τ ve h 'den bağımsızdır. Aynı şekilde F_{M-1k}^2 için aşağıdaki eşitsizliği ispatlayabiliriz.

$$\begin{aligned} |F_{M-1k}^2|^2 &\leq c_{30} \frac{\tau}{h^3} \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_2+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt + \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x \partial t} \right|^2 dx dt \right] + \\ &+ c_{31} \frac{h}{\tau} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{x_1-h/2}^{x_1+h/2} \left| \frac{\partial^3 \psi(x,t)}{\partial x^3} \right|^2 dx dt, \quad k = \overline{1, N}. \end{aligned} \quad (3.2.2.23)$$

(3.2.2.16), (3.2.2.22), (3.2.2.23) eşitsizliklerini τ ve h adımları için uyum şartını kullanarak F_{jk}^2 için aşağıdaki değerlendirmeyi elde ederiz:

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^2|^2 \leq c_{32} (\tau^2 + h^2). \quad (3.2.2.24)$$

Böylece $F_{jk}^1 = 0$ olduğunu ve (3.2.2.12), (3.2.2.24) eşitsizlikleri dikkate alınarak, (3.2.2.10) eşitliğinin yardımıyla

$$\tau h \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^{M-1} |F_{jk}^1|^2 \leq c_{33} (\tau^2 + h^2) \quad (3.2.2.25)$$

eşitsizliği ispatlanmış olur. Bu eşitsizliği (3.2.2.9) kestiriminde kullanırsak teoremin hükmünün geçerli olduğu ispatlanır. Teorem 3.2.2.2 ispatlandı.

3.2.3 Nümerik Çözüm Algoritması

Bir önceki alt bölümlerde incelediğimiz 1. ve 2. çeşit sınır değer problemlerinin nümerik çözüm algoritmasını elde etmek için incelediğimiz her iki problemi de içeren aşağıdaki problemi göz önüne alalım:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + a_0 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a(x)\psi + V(t)\psi = f(x,t), \quad (x,t) \in \Omega, \quad (3.2.3.1)$$

$$\psi(x,0) = \varphi(x), \quad x \in (0,\ell) \quad (3.2.3.2)$$

$$\alpha_0 \frac{\partial \psi(0,t)}{\partial x} + \beta_0 \psi(0,t) = y_0(t), \quad t \in (0,T), \quad (3.2.3.3)$$

$$\alpha_1 \frac{\partial \psi(\ell,t)}{\partial x} + \beta_1 \psi(\ell,t) = y_1(t), \quad t \in (0,T). \quad (3.2.3.4)$$

Burada $\ell > 0, T > 0, L > 0, a_0 > 0, \alpha_0, \alpha_1 \geq 0, \beta_0, \beta_1 \geq 0$ verilen sayılar; $a(x), V(t), \varphi_0(x), f(x,t), y_0(t), y_1(t)$ verilen fonksiyonlardır.

Şimdi bu problemin nümerik çözümünü yapmak için çözüm algoritması oluşturmamız gerekir. Bu amaçla aşağıdaki gibi fark şeması oluşturalım.

Fark şeması için $\bar{\Omega} = (0,\ell) \times (0,T)$ bölgesini

$\{(x_j, t_k) : x_j = jh, j = \overline{0, M}, t_k = k\tau, k = \overline{0, N}\}$ ağına dönüştürelim. Burada $M > 0, N > 0$, verilen tamsayılar, h adımı x 'e, τ adımı t 'ye göre seçilen adımlardır. $\psi(x_j, t_k)$ değerlerine karşılık gelen ağ fonksiyonunu Φ_{jk} ile gösterelim. Bu durumda

$$i \delta_t \Phi_{jk} + a_0 \delta_{xx} \Phi_{jk} - a^j \Phi_{jk} + V_k \Phi_{jk} = f_{jk}, \quad (3.2.3.5)$$

$$j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}$$

$$\Phi_{j0} = \varphi_j, \quad j = \overline{0, M}, \quad (3.2.3.6)$$

$$\alpha_0 \delta_x \Phi_{1k} + \beta_0 \Phi_{1k} = y_{0k}, \quad k = \overline{1, N}, \quad (3.2.3.7)$$

$$\alpha_1 \delta_x \Phi_{Mk} + \beta_1 \Phi_{Mk} = y_{1k}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (3.2.3.8)$$

sistemi elde edilir.

Bu cebirsel denklemler sisteminin çözümünü bulmak için kovma yöntemini uygulayacağız. Bu amaçla (3.2.3.5) - (3.2.3.8) şartlarını açık biçimde yazıp sistemi üç köşegenli sisteme dönüştürmeye çalışalım. Bu durumda $j = \overline{1, M-1}$, $k = \overline{1, N}$ için

$$i \frac{\Phi_{jk} - \Phi_{jk-1}}{\tau} + a_0 \frac{\Phi_{j+1k} - 2\Phi_{jk} + \Phi_{j-1k}}{h^2} - a^j \Phi_{jk} + v_k \Phi_{jk} = f_{jk}$$

olup bu eşitliğin her iki tarafı τ ile çarparsak,

$$\begin{aligned} & i\Phi_{jk} - i\Phi_{jk-1} + \\ & + a_0 \frac{\tau}{h^2} \Phi_{j+1k} - 2a_0 \frac{\tau}{h^2} \Phi_{jk} + a_0 \frac{\tau}{h^2} \Phi_{j-1k} + \\ & + \tau a^j \Phi_{jk} + \tau v_k \Phi_{jk} = \tau f_{jk} , \\ & = a_0 \frac{\tau}{h^2} \Phi_{j+1k} + \left[i + 2a_0 \frac{\tau}{h^2} + \tau a^j + \tau v_k \right] \Phi_{jk} + \\ & + a_0 \frac{\tau}{h^2} \Phi_{j-1k} = \tau f_{jk} + i\Phi_{jk-1} , \quad j = \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N} \end{aligned}$$

elde edilir. Burada

$$\begin{aligned} A_{jk} &= a_0 \frac{\tau}{h^2} , \quad B_{jk} = a_0 \frac{\tau}{h^2} , \quad C_{jk} = -i + 2a_0 \frac{\tau}{h^2} + \tau a^j + \tau v_k \\ F_{jk} &= -\tau f_{jk} - i\Phi_{jk-1} \end{aligned}$$

gösterimlerini yaparsak, sonucu eşitlikten $j = \overline{1, M-1}, k = \overline{1, N}$ için

$$A_{jk} \Phi_{j-1k} - C_{jk} \Phi_{jk} + B_{jk} \Phi_{j+1k} = -F_{jk} , \quad (3.2.3.9)$$

üç köşegenli cebirsel denklem sistemini elde ederiz.

Bu sistemin çözümü için kovma algoritmasını uygulayalım. Bu amaçla ilk önce bu sistem için sınır değer şartlarını belirleyelim. (3.2.3.3) ve (3.2.3.4) sınır değer şartlarına karşılık gelen sınır değer şartını elde etmek için aşağıdaki işlemleri yapalım:

$$\alpha_0 \frac{\Phi_{1k} - \Phi_{0k}}{h} + \beta_0 \Phi_{1k} = y_{0k},$$

$$\alpha_0 \Phi_{1k} - \alpha_0 \Phi_{0k} + \beta_0 h \Phi_{1k} = h y_{0k}$$

$$\alpha_0 \Phi_{0k} = \alpha_0 \Phi_{1k} + \beta_0 h \Phi_{1k} - h y_{0k}$$

$$\Phi_{0k} = \left(\frac{\alpha_0 - \beta_0 h}{\alpha_0} \right) \Phi_{1k} - \frac{h y_{0k}}{\alpha_0}$$

$$\chi_{1k} = \frac{\alpha_0 - \beta_0 h}{\alpha_0}, \quad \mu_{1k} = -\frac{h y_{0k}}{\alpha_0}$$

$$\alpha_1 \frac{\Phi_{Mk} - \Phi_{M-1k}}{h} + \beta_1 \Phi_{Mk} = y_{1k},$$

$$\Phi_{Mk} (\alpha_1 + \beta_1 h) = \alpha_1 \Phi_{M-1k} + h y_{1k}$$

$$\Phi_{Mk} = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \beta_1 h} \Phi_{M-1k} + \frac{h y_{1k}}{\alpha_1 + \beta_1 h}$$

$$\chi_{2k} = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \beta_1 h}, \quad \mu_{2k} = \frac{h y_{1k}}{\alpha_1 + \beta_1 h}$$

Böylece (3.2.3.9) için aşağıdaki sınır değer şartlarını elde ederiz.

$$\Phi_{0k} = \chi_{1k} \Phi_{1k} + \mu_{1k} \quad (3.2.3.10)$$

$$\Phi_{Mk} = \chi_{2k} \Phi_{M-1k} + \mu_{2k} \quad (3.2.3.11)$$

Böylece (3.2.3.10) - (3.2.3.11) sistemi için kovma yöntemini uygularsak aşağıdaki eşitsizliği yazabiliriz.

$$\Phi_{jk} = \alpha_{j+1k} \Phi_{j+1k} + \beta_{j+1k}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}, \quad (3.2.3.12)$$

Burada α_{j+1k} ve β_{j+1k} kovma katsayıları olup aşağıdaki Cauchy probleminin çözümüdür

$$\alpha_{j+1k} = \frac{B_{jk}}{C_{jk} - \alpha_{jk} A_{jk}}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}, \quad (3.2.3.13)$$

$$\beta_{j+1k} = \frac{\alpha_{jk} B_{jk} + F_{jk}}{C_{jk} - \alpha_{jk} A_{jk}}, \quad j = \overline{1, M-1}, \quad k = \overline{1, N}, \quad (3.2.3.14)$$

$$\alpha_{1k} = \chi_{1k}, \quad \beta_{jk} = \mu_{1k}, \quad (3.2.3.15)$$

(3.2.3.12) formülü ile sistemin çözümünü bulmak için,

$$\Phi_{Mk} = \frac{\chi_{2k}\beta_{Mk} + \mu_{2k}}{1 - \chi_{2k}\alpha_{Mk}} ,$$

şartını kullanarak sağdan sola doğru tüm Φ_{jk} 'leri bulabiliriz. Böylece (3.2.3.1)-(3.2.3.4) probleminin nümerik çözümünü bulmak için kovma yönteminin algoritmasını açıkladık.

4. ARAŐTIRMA BULGULARI

Tezin 3.1. bölümünde 1. çeřit bařlangıç sınır deęer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark Őeması oluřturuldu , fark Őemasının çözüümü için kararlılık kestirimi elde edildi ve kararlılık kestirimi kullanılarak fark Őemasının hatası için kestirim ispatlandı.

Tezin 3.2. bölümünde ise 2. çeřit bařlangıç sınır deęer problemi tanımlanıp bu probleme ait fark Őemasının çözüümü için kararlılık kestirimi elde edildi ve bu kestirim kullanılarak fark Őemasının hatası deęerlendirildi. 3.2. bölümünde son olarak 1. ve 2. çeřit bařlangıç sınır deęer problemlerinin nümerik çözüüm algoritması oluřturuldu.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Tezde ele alınan başlangıç sınır deęer problemleri konulma aısından önceki çalışmalarındaki problemlerden önemli biçimde farklılaşmaktadır. Tezde incelenen problemler çok az incelendiğinden tez çalışması gerek teorik, gerekse pratik açıdan önem taşır.

Bu tezde ilk kez Schrödinger denklemi için başlangıç sınır deęer problemlerinin çözüm algoritması inşa edilmiş ve bu amaçla kovma yöntemi uygulanmıştır. Bu tezde elde edilen araştırma bulguları diye adlandırdığımız sonuçlar, önceki çalışmalarındaki sonuçlardan farklıdır ve onlarla örtüşmez.

6.KAYNAKLAR

[1] Yıldırım Aksoy, N., “Lineer Olmayan Schrödinger Denkleminin Sınırsız Katsayısıyla Optimal Kontrol Problemleri ve Onların Sonlu Fark Yaklaşımı”, Doktora Tezi, Atatürk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2009.

[2] Ibrahimov, N.S., “ The convergence of the difference method for solving the problem of identification of non-stationary equation of quasi optics”, Scientific Proceedings of the Azerbaijan SSR. tehn. Univ. Ser. Basic Sciences ” , № 4, p.54-60, 2010 , (Rusça).

[3] Iskenderov, A.D., Yagubov, G.Y., Ibrahimov, N.S., “ About an estimate of convergence of difference approximations by the functional in the identification problem for the non stationary equation of quasi optics / / Abstracts of the XIX International Conference Problems of Decision Making under Uncertainties” (PDMU-2012), Mukachevo, Ukraine, April 23-27, p.118-120. , 2012.

[4] Iskenderov, A.D., Yagubov, G.Y., Musayeva, M.A. “ Kuantum potansiyellerinin identifikasyonu”, Çaşıoğlu Yayınevi, 552 s., Bakü, 2012, (Rusça).

[5] Landau, L.D., Lipschitz, E.M., Kuantum Mekanigi, Cilt 3, 702 s., Moskova, 1963 , (Rusça).

[6] Mahmudov, N.M., “Lions Fonksiyonelli Kuantum Mekanik Sistemler için Optimal Kontrol Probleminin Farklar Metoduyla Çözümü”, Azerbaycan Bilimler Akademisi Matematik Mekanik Enstitüsü Eserleri, 7, 79-82 s., 1997, (Rusça).

[7] Potapov M.M., Razgulin A.V., Şameeva T.Y., “ Schrödinger Tipli Optimal Kontrol Probleminin Yaklaşımı ve Regülarizasyonu”, Moskova Devlet Üniversitesi Haberleri “Nümerik Analiz ve Sibernetik” , 15(1),8-13 s., 1987, (Rusça).

[8] Razgulin A.V., “Lineer Olmayan Schrödinger Denklemi için Kontrol Problemlerinin Yaklaşımları”, Moskova Devlet Üniversitesi Haberleri “Nümerik Analiz ve Sibernetik” , 15(2), 28-33 s., 1998, (Rusça).

[9] Samarskiy, A.A., Andreev, V.B., “Eliptik Denklem için Fark Metotları”, Moskova, Nauka, 1976, (Rusça).

- [10] Samarskiy, A.A., Lazarov, R.D., Makarov, V.L., “Genellesmiş Çözümlü Diferansiyel Denklemler için Fark Şemaları”, Moskova, Vıssaya Skola, 296s., 1987, (Rusça).
- [11] Senger, Ö., “Lineer Schrödinger Denklemi için Sınır Değer Probleminin Çözümüne ait Yüksek Mertebeden Kestirimler ve Onların Uygulamaları”, Yüksek Lisans Tezi, Kafkas Üniversitesi , Fen Bilimleri Enstitüsü , 53 s. , Kars, 2006.
- [12] Silla, N., “ Schrödinger Tipli Kuantum Mekanik Sistemler için Optimal Kontrol Problemlerinin Nümerik Çözümü”, Doktora Tezi, Bakü Devlet Üniversitesi, 165 s., Bakü, 1991, (Rusça).
- [13] Vorontsov M.A., Şmalqauzen V.I. “Adaptiv Optiğin Prensipleri”, Moskova, Nauka, 1985, (Rusça).
- [14] Yagub G., Ibrahimov N.S., Yildirim Aksoy, N., Deveci O., “The solution with difference method of on optimal control problem for nonstationary quasi optics equation” Abstracts of the XXI International Conference Problems of Decision Making under. Uncertainties (PDMU-2013), 13-17 , p.68-71. , Shodnitsa, Ukraine, May , 2013.
- [15] Yagubov, G.Ya., “Kuazi Lineer Schrödinger Denklemi'nin Katsayısı ile Optimal Kontrol”, Bilimler Doktoru Tezi, 318 s., Kiev, 1994, (Rusça).
- [16] Yagubov, G.Ya., Musayeva, M.A., “ Finite-Difference Method Solution of Variation Formulation of an Inverse Problem for Nonlinear Schrodinger Equation” Izv. AN Azerb.-Ser.Physic.tech.matem.nauk , vol.16, No 1-2, p. 46-51., 1995, (Rusça).
- [17] Yagubov, G.Ya., “Quazi-Lineer Schrödinger Denkleminin Katsayısıyla Bölgenin sınırı üzerinden integrale verilen Kriteria sahip Optimal Kontrol Probleminin Çözümü için Fark Yöntemi”, Matematik Modellemenin Temelleri ve Optimal Kontrol Dergisi, 37-48 s., Bakü., 2001, (Rusça).
- [18] Yetiskin, H., “Kompleks Potansiyelli Schrödinger Denklemi için Optimal Kontrol Problemi ve Onun Sonlu Farklar Yaklaşımı”, Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Atatürk Üniversitesi, 92 s. , 2005.
- [19] Yıldız, B., Yagubov, G.Ya., “On an optimal control problem”, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol 88, p. 275–287, 1997.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Murat VARGÜN

Doğum Yeri : KARS

Doğum Tarihi : 10.09.1983

Medeni Hali : Bekâr

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu(Kurum ve Yıl)

Lise : Cumhuriyet Lisesi Kars (1997-2000)

Lisans : Harran Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi
Matematik(2001-2006)

Yüksek Lisans: Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik
Anabilim Dalı (2011-2013)