

T.C.
İSTANBUL KÜLTÜR ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

KLEIN GORDON SCHRÖDINGER DENKLEMİ İÇİN KOMPAKT
BÖLÜNMÜŞ ORTALAMA VEKTÖR ALANI YÖNTEMİ

DOKTORA TEZİ

Pelin ŞAYLAN

1900005993

Anabilim Dalı: Matematik ve Bilgisayar Bilimleri

Program: Matematik

Tez Danışmanı : Dr. Öğr. Üyesi Canan AKKOYUNLU

HAZİRAN 2026

T.C.
İSTANBUL KÜLTÜR ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

KLEIN GORDON SCHRÖDINGER DENKLEMİ İÇİN KOMPAKT
BÖLÜNMÜŞ ORTALAMA VEKTÖR ALANI YÖNTEMİ

DOKTORA TEZİ
Pelin ŞAYLAN
1900005993

Anabilim Dalı: Matematik ve Bilgisayar Bilimleri
Program: Matematik

Tez Danışmanı : Dr. Öğr. Üyesi Canan AKKOYUNLU
Tez Eş Danışmanı : Prof. Dr. Ayhan AYDIN
Diğer Jüri Üyeleri: Prof. Dr. Murat UZUNCA
Prof. Dr. Erdoğan Mehmet ÖZKAN
Doç. Dr. Mehmet Fatih UÇAR
Dr. Öğr. Üyesi Günay ASLAN

HAZİRAN 2026

ÖNSÖZ

Tez çalışmamın her aşamasında deneyimlerini, bilgilerini benimle paylaşan, yüksek lisans sürecimden itibaren bana cesaret veren sonsuz sabrı ve emeğiyle bana katkı sağlayan çok değerli danışmanım Dr. Öğr. Üyesi Canan Akkoyunlu'ya en içten şükranlarımı sunuyorum.

Tez çalışma sürecimin her aşamasında bana destek olan, bilgisi ve emekleriyle yoluma ışık tutan çok değerli eş danışmanım Prof. Dr. Ayhan Aydın'a en içten teşekkürlerimi sunuyorum.

İstanbul Kültür Üniversitesi Matematik ve Bilgisayar Bilimleri Bölümü hocalarıma katkıları ve emekleri için çok teşekkür ediyorum.

Hayatımın her anındaki en büyük destekçim olan canım aileme sonsuz teşekkürler. İyi ki varsınız.

Haziran 2026

Pelin Şaylan

İçindekiler

ÖNSÖZ	i
KISALTMALAR	iv
TABLO LİSTESİ	v
ŞEKİL LİSTESİ	vi
ÖZET	vii
ABSTRACT	ix
1 GİRİŞ	1
2 TEMEL BİLGİLER	5
2.1 Kısmi Türevli Diferansiyel Denklem	5
2.2 Sayısal Yöntemler	6
2.2.1 Sonlu Farklar Yöntemi	9
2.2.2 Tek Adım Yöntemleri	11
2.2.3 Tek Adımlı Yöntemlerin Yakınsaklığı	14
2.3 Enerji Koruyan Sayısal Yöntemler	15
2.3.1 Ortalama Vektör Alanı Yöntemi	15
2.3.2 Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Yöntemi	17
2.3.3 Ek, Bileşke ve Toplam Yöntemleri	19
2.4 Sonsuz ve Sonlu Boyutlu Hamilton Sistemler	19
2.4.1 Bir Boyutlu Lineer Olmayan Schrödinger Denklemleri	22
2.4.2 Lineer Olmayan İkili Schrödinger Denklemleri	24

3	KOMPAKT YÖNTEM	28
3.1	Birinci Basamaktan Türev için Kompakt Sonlu Fark Tasarısı	29
3.2	İkinci Basamaktan Türev için Kompakt Sonlu Fark Tasarısı	33
4	KLEIN GORDON SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN SAYISAL ÇÖZÜMLERİ	35
4.1	Sonsuz ve Sonlu Boyutlu Klein Gordon Schrödinger Denklemi	36
4.2	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Ortalama Vektör Alanı Yöntemi	39
4.3	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Yöntemi	39
4.4	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Ek-BOVA Yöntem	41
4.5	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Bileşke Yöntemi	42
4.6	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Toplam Yöntemi	43
4.7	Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kütle ve Enerji Koruyan Sonlu Fark Tasarısı	43
5	KLEIN GORDON ZAKHAROV DENKLEMLERİ İÇİN ENERJİ KORUYAN SONLU FARK TASARISI	51
5.1	Ayrık Enerjinin Korunumu	52
5.2	Sonlu Fark Tasarı için Bazı Ön Kestirimler	54
5.3	Sonlu Fark Tasarısının Yakınsaklığı	55
6	SAYISAL SONUÇLAR	60
6.1	Tek Soliton	61
6.2	İki Solitonun Çarpışması	64
7	SONUÇ	67
	KAYNAKÇA	73
	ÖZGEÇMİŞ	74

KISALTMALAR

KGS	: Klein Gordon Schrödinger Denklemi
NLS	: Lineer olmayan Schrödinger Denklemi
OVA	: Ortalama vektör alanı yöntemi
BOVA	: Bölünmüş ortalama vektör alanı yöntemi
BOVA-B	: Bölünmüş ortalama vektör alanı bileşke yöntemi
BOVA-T	: Bölünmüş ortalama vektör alanı toplam yöntemi
H	: Hamilton



TABLO LİSTESİ

6.1	Sabit $h = 0.125$ için $T = 1$ anındaki hatalar ve sayısal yöntemleri zamansal basamakları.	61
6.2	$\phi(x, t)$ için kararlılık testi: $T = 3$ anında farklı $r = \tau/h$ oranlarda $e_\infty(\phi)$ hataları.	62
6.3	$\tau = 0.1$ zaman adım büyüklüğü ile elde edilen CPU süreleri.	63
6.4	İki solitonun çarpışmasında CPU süreleri, $\tau = 0.1$	66

ŞEKİL LİSTESİ

6.1	$\tau = 0.01$, $h = 0.2$ için kompakt BOVA yöntemi (4.12) ile elde edilen tek soliton profilleri.	63
6.2	Dört enerji koruyan yöntemin, tek solitonun evrimi için bağıl enerji hatası ve bağıl kütle hatası $\tau = 0.01$, $h = 0.2$	63
6.3	Dört enerji koruyan yöntem kullanılarak elde edilen iki solitonun profilleri, $\tau = 0.01$, $h = 0.2$	65
6.4	İki solitonun evrimi için dört enerji koruyan yöntemin bağıl enerji hatası ve bağıl kütle hatası $\tau = 0.01$, $h = 0.2$	65

Enstitüsü : Lisansüstü Eğitim Enstitüsü
Dalı : Matematik ve Bilgisayar Bilimleri
Programı : Matematik Doktora
Tez Danışmanı : Dr. Öğr. Üyesi Canan AKKOYUNLU
Tez Eş Danışmanı : Prof. Dr. Ayhan AYDIN
Tez Türü ve Tarihi : Doktora - Haziran 2026

KISA ÖZET

Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama
Vektör Alanı Yöntemi
Pelin Şaylan

Bu tez çalışmasında bir boyutlu Klein Gordon Schrödinger (KGS) denkleminin sayısal çözümü için yapı koruyan yeni sayısal yöntemler önerilmiştir. Bir boyutlu KGS denkleminde uzay değişkeni kompakt yöntem ile ayrıklaştırılmış ve zamana bağlı yarı-ayrık bir adi türevli diferansiyel denklem sistemi elde edilmiştir. Elde edilen bu yarı-ayrık adi türevli diferansiyel denklem sisteminin bir Hamilton denklem sistemi olduğu kanıtlanmıştır. Ardından bu Hamilton sistemi Ortalama Vektör Alanı (OVA) yöntemi ile ayrıklaştırılarak doğrusal olmayan bir denklem sistemi elde edilmiş ve Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı (BOVA) yöntemi ile ayrıklaştırılarak yarı-doğrusal bir denklem sistemi elde edilmiştir. Önerilen bu ayrıklaştırma yöntemlerinde OVA yönteminin KGS denkleminin sadece ayrık enerjisini korurken BOVA yöntemi ile elde edilen yöntemin KGS denkleminin hem ayrık enerjisini hem de ayrık momentumunu koruduğu kanıtlanmıştır. BOVA yöntemi ile ilişkili olarak BOVA bileşke yöntemi ve BOVA toplam yöntemleri de ayrıca incelenmiştir. Yapı koruyan bu sayısal yöntemlere ek olarak KGS denkleminin ayrık enerji ve ayrık momentumunu koruyan ayrı bir sonlu fark tasarısı daha önerilmiştir. Teorik sonuçlar sayısal sonuçlarla doğrulanmıştır.

Anahtar Kelimeler : Klein Gordon Schrödinger Denklemi, Kompakt Yöntem, Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Yöntemi, Sonlu Fark Yöntemi.



University : Istanbul Kültür University
Institute : Institute of Graduate Studies
Department : Mathematics and Computer Science
Programme : PhD in Mathematics
Supervisor : Assistant Professor Canan AKKOYUNLU
Co-Supervisor : Prof. Dr. Ayhan AYDIN
Degree Awarded and Date : PhD. - June 2026

ABSTRACT

Compact Partitioned Average Vector Field Method for the Klein Gordon
Schrödinger Equation

Pelin Şaylan

In this thesis, structure-preserving numerical methods are proposed for the numerical solution of the one-dimensional Klein Gordon Schrödinger (KGS) equation. In the one-dimensional KGS equation, the spatial variable is discretized by the compact finite difference method, and a time-dependent semi-discrete ordinary differential equation system is obtained. It is proved that the resulting semi-discrete ordinary differential equation system is a Hamiltonian system. Subsequently, this Hamiltonian system is discretized by the Average Vector Field (AVF) method, resulting in a non-linear system of equations, and by the Partitioned Average Vector Field (PAVF) method, resulting in a semi-linear system of equations. Among these proposed discretization methods, it is proved that the AVF method preserves only the discrete energy of the KGS equation, whereas the method obtained by the PAVF method preserves both the discrete energy and the discrete momentum of the KGS equation. In connection with the PAVF method, the PAVF composition method and the PAVF plus method are also investigated. In addition to these structure-preserving numerical methods, a separate finite difference scheme that preserves the discrete energy and the discrete momentum of the KGS equation is also proposed. The theoretical results are verified by numerical results.

Key Words: Klein Gordon Schrödinger Equation, Compact Method, Partitioned Average Vector Field Method, Finite Difference Method.

Science Code : 20404



Bölüm 1

GİRİŞ

Doğada gözlemlenen pek çok olay, belirli kurallar çerçevesinde işleyen düzenli bir yapının varlığına işaret etmektedir. Bu yapıyı ve doğa yasalarının temelini kavrayabilmek amacıyla farklı bilim dallarında çeşitli teoriler ve modeller geliştirilmiştir. Özellikle mühendislik, fizik ve matematik alanlarında karşılaşılan karmaşık problemlerin çözülebilmesi için geliştirilen yaklaşımlarda, matematiksel modelleme önemli bir rol oynamaktadır. Bu kapsamda, diferansiyel denklemler, fiziksel olayları temsil etmek ve bu olaylara dair öngörülerde bulunmak için güçlü bir araç olarak kullanılmaktadır. Ancak, özellikle lineer olmayan kısmi türevli diferansiyel denklemlerin analitik yollarla çözülmesi her zaman mümkün olmadığından, bu gibi durumlarda nümerik yöntemlere başvurulmaktadır. Son yıllarda yapılan araştırmalarda, bu denklemlerin yaklaşık çözümlerini elde etmek amacıyla çeşitli nümerik teknikler geliştirilmiş; özellikle soliton çözümleri ve yapı koruyan yöntemler üzerine yoğunlaşmıştır. Kullanılan yöntemlerin başarısı, sistemin enerji, momentum, simetri ve simplektik yapı gibi temel geometrik özelliklerini koruyabilme yeteneğine göre değerlendirilmektedir. Matematikte ve bir çok bilim dalında da karşılaşılan çeşitli problemler, sayısal yöntemler aracılığıyla çözüme kavuşturulabilir. Bu yöntemlerde yer alan denklemlerin hesaplanması, problemlerin sahip olduğu karmaşık yapılar ve çözümün hem hızlı hem de doğru bir şekilde elde edilme gerekliliği, teknolojik gelişmeleri de beraberinde getirmiştir. Bu gelişmeler doğrultusunda, bilgisayar destekli hesaplamalarla yaklaşık çözümlere ulaşmak amacıyla sonlu farklar yöntemi yaygın olarak kullanılmıştır [1].

Bilgi işlem kapasitesinin artmasıyla birlikte bilgisayar tabanlı uygulamaların bi-

limsel çalışmalardaki rolü giderek daha belirgin hale gelmiştir. Bu gelişim, özellikle sayısal yöntemlerin çeşitlenmesine ve yaygınlaşmasına olanak sağlamıştır. Geliştirilen yöntemler arasında sonlu farklar yöntemi ve sonlu elemanlar yöntemi, geniş kullanım alanları ve etkin çözümler sunmaları nedeniyle öne çıkan iki temel yöntemdir [2].

Atom moleküllerin davranışlarını anlamaya yönelik yapılan çalışmalar, bu parçacıkların yalnızca tanecik değil, aynı zamanda dalga özelliği de taşıdığını göstermiştir. Bu gözlemler, atom moleküllerinin davranışını bir dalga denklemiyle tanımlanabileceği fikrini doğurmuştur. Bu yaklaşımı matematiksel bir temele oturtarak ilk kez ifade eden kişi Schrödinger olmuş ve kendi adını taşıyan denklemle bu modeli formüle etmiştir. Schrödinger denkleminin çözümlerinde ise, Fourier'ın geliştirdiği ve özdeğer (eigenvalue) yöntemi olarak bilinen matematiksel teknik temel alınmıştır [3].

Solitonlar, şekillerini değiştirmeden sabit hızla hareket eden dalgalardır. İki soliton çarpıştığında solitonların şekilleri ve hızları değişmez. 1834 yılında soliton dalgası ilk kez John Scott Russell tarafından keşfedilmiştir [4].

Lineer olmayan Schrödinger denklemi (NLS), soliton çözüme sahip parabolik bir denklemdir ve fizikte çeşitli olayları modellemek için kullanılır. Solitonlar, fiber optik iletişimde dispersiyonun etkisini dengeleyerek ışık darbelerinin uzun mesafeler boyunca bozulmadan ve sabit hızla iletilmesini sağlarken, akışkanlar dinamiğinde doğrusal olmayan yüzey dalgalarının şekillerini koruyarak yayılımını modellemek amacıyla kullanılmaktadır.

1967 yılında zayıf dalga paketleri için NLS denklemi ilk olarak Benney ve Newell tarafından önerilmiştir. 1968 yılında ise Benney ve Newell'den bağımsız olarak Zakharov tarafından tekrar üretilmiştir [5]. NLS denkleminin sayısal çözümü için literatürde yapılmış bir çok çalışma vardır ve denklemin önemine atfen bu çalışmalar halen devam etmektedir. Ablowitz ve Ladik, 1975 yılında integrallenebilir sonlu fark şemalarını NLS denklemi için geliştirmiştir [6]. Hersbst ve Weidemann 1986 yılında NLS denklemi için parçalara ayırma yönteminin analizini yapmıştır [7]. Parçalara ayırma yöntemi, NLS denkleminin Hamilton yapısını koruyan çok hızlı pseudo-spectral şemadır. NLS denkleminin sayısal çözümü için son yıllarda simplektik ve çoklu simplektik yöntemler [8] ve Ortalama Vektör Alanı (OVA) gibi yapı-koruyan sayısal yöntemler önerilmiştir (bkz.[8, 9] ve buradaki referanslar).

Daha karmaşık fiziksel sistemlerde yalnızca Schrödinger tipi dinamikler yeterli

olmadığından, farklı alan bileşenlerinin etkileşimini içeren bağlı modellere ihtiyaç duyulmuştur. Bu bağlamda, Klein Gordon tipindeki relativistik alanlar ile Schrödinger tipi nonrelativistik dalgaları bir araya getiren Klein Gordon Schrödinger (KGS) denklemi kullanılmıştır. KGS denklemi daha geniş fiziksel uygulamaların modellenmesine olanak sağlamaktadır. Bu sayede, parçacık–alan etkileşimlerinin daha gerçekçi bir şekilde temsil edilmesi, enerji transfer mekanizmalarının incelenmesi ve çok ölçekli doğrusal olmayan dalga etkileşimlerinin modellenmesi mümkün olmuştur. KGS denklemi özellikle kuantum alan teorisi ve çok bileşenli fiziksel sistemlerde, tek alanlı modellere göre daha kapsamlı bir yapı sunduğu için tercih edilmektedir.

KGS denklemi üzerine birçok teorik çalışma mevcuttur. Özel olarak global düzgün çözümlerin varlığını ve tekliğini gösterilmiştir [10, 11, 12]. Ayrıca çekiciler [13], global çözümler [14], asimptotik davranış ve kararlılık [15] gibi matematiksel özellikleri literatürde detaylı bir şekilde incelenmiştir. KGS denkleminin analitik çözümü olmadığı için sayısal çözüm yapılması zorunludur. KGS denkleminin sayısal çözümü üzerine literatürde yapılmış birçok etkin çalışma bulunmaktadır. Zhang ve arkadaşları [16], bir sonlu fark yöntemi inşa etmiş ve bu yöntemin yakınsaklığını önsel kestirimler ile norm eşitsizliklerine dayanarak analiz etmiştir. Wang ve arkadaşları [17], uzayda parçalı kübik Hermite interpolasyonlarını kullanarak ve zamanda sonlu fark yöntemleri ile birleştirerek, ayrık zamanlı ortogonal spline kolokasyon şemalarından oluşan bir sınıf önermiştir. Xiang [18] korunumlu spektral bir şema inşa etmiştir. Bao ve arkadaşları [19] KGS denkleminin yaklaşık çözümleri için sönüm terimi içeren ve içermeyen etkin, koşulsuz kararlı, doğru sayısal yöntemler sunmuştur. Dehghan ve arkadaşları [20] uzaysal değişkenin yaklaşık çözümü için Chebyshev psödospektral kolokasyon yöntemi ve zaman ayrıklaştırması için açık Runge–Kutta yöntemini önermiştir. Kong ve arkadaşları [21] yarı norm korunumlu multi simplektik bir şema önermiştir. Kong ve arkadaşları [22] kütle ve enerjiyi koruyan açık bir simplektik bölünmüş Runge–Kutta Fourier psödospektral şeması önermiştir. Hong ve arkadaşları [23], açık multi simplektik şemalar önermiştir. Zhang ve arkadaşları [24], korunumlu bir sonlu fark şeması önermiştir. Zhang [25], Sinc kolokasyon ayrık gradyan yöntemini önermiştir.

Bu tez çalışmasında KGS denkleminin sayısal çözümünü elde etmek için, denklemde uzay değişkeni içeren türevler kompakt sonlu farklar yöntemi ile ayrıklaştırılmış ve zaman değişkenine göre bir Hamilton adi türevli diferansiyel denklem sistemi elde edilmiştir. Elde edilen bu denklem sistemi bölünmüş ortalama vektör alanı yöntemi

ile ayrıklaştırılmış ve böylece KGS denkleminin sayısal çözümü için daha önceden çalışılmamış bir sayısal yöntem geliştirilmiştir. Bölünmüş ortalama vektör alanı yöntemine bağlı olarak ayrıca ek yöntem, bileşke yöntemi ve toplam yöntemi önerilmiştir. Bölünmüş ortalama vektör alanı yönteminin KGS denkleminin ayrık kütlelerini ve ayrık enerjiyi tam olarak koruduğu ispatlanmıştır. Bu yönteme ek olarak KGS denklemi için enerji koruyan bir başka sayısal sonlu fark tasarısı önerilmiştir. Önerilen bu sayısal yöntemin enerji ve kütleyi tam olarak koruduğu ispatlanmıştır. Tüm bu önerilen sayısal yöntemler için çeşitli sayısal sonuçlar verilmiş ve önerilen yöntemlerin kütle ve enerji korunumları sayısal olarak da gösterilmiştir.

Bu tez çalışmasının ana hatları şu şekildedir: Birinci bölümde genel bir literatür özetine yer verilmiştir. İkinci bölümde temel kavramlar verilmiştir. Üçüncü bölümde kompakt yöntem ile ilgili bilgi verilmiştir. Dördüncü bölümde Klein Gordon Schrödinger denkleminin nümerik çözümleri için önerilen yeni yöntemlerin sayısal sonuçları ele alınmıştır. Beşinci bölümde Klein Gordon Zakharov denklemi için önerilen bir sonlu fark tasarımının korunum özellikleri ile yakınsaklık analizi tartışılmıştır. Son olarak, elde edilen sayısal sonuçlar özetlenmiştir.

Bölüm 2

TEMEL BİLGİLER

2.1 Kısmi Türevli Diferansiyel Denklem

İçinde en az iki bağımsız ve en az bir bağımlı değişken ile bağımlı değişkenin bağımsız değişkenlere göre çeşitli mertebeden kısmi türevlerini içeren eşitliklere kısmi türevli diferansiyel denklem denir. Bağımlı değişken u , bağımsız değişkenler x ve y olmak üzere ikinci basamaktan bir kısmi türevli diferansiyel denklem genel olarak

$$F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}) = 0 \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $U \subset \mathbb{R}^8$ olup $F : U \rightarrow \mathbb{R}$ bir fonksiyondur. Bir kısmi türevli diferansiyel denklem, bilinmeyen fonksiyon u ve onun kısmi türevlerinin denkleme yalnızca lineer olarak dahil olduğu; yani bilinmeyen fonksiyonun ve kısmi türevlerinin birbirleriyle çarpılmadığı, kuvvetlerinin alınmadığı ve herhangi bir lineer olmayan fonksiyonun içinde yer almadığı durumda lineer kısmi diferansiyel denklem olarak adlandırılır. Ayrıca, bu terimlerin katsayıları yalnızca bağımsız değişkenlere bağlıdır.

Birinci mertebeden iki bağımsız değişkenli bir lineer kısmi diferansiyel denklem

$$A(x, y)u_x + B(x, y)u_y + C(x, y)u = D(x, y) \quad (2.2)$$

şeklinde ifade edilir. Bir kısmi diferansiyel denklem, bilinmeyen fonksiyon u ve kısmi türevleri açısından lineer değilse bu denklem lineer olmayan kısmi türevli diferansiyel denklem olarak adlandırılır. Örneğin

$$4y \frac{\partial u}{\partial x} + 6x \frac{\partial u}{\partial y} + 4zy \frac{\partial u}{\partial z} = 0$$

birinci mertebeden lineer kısmi türevli diferansiyel denklemdir. Öte yandan

$$x\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + y\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 = z$$

ise birinci mertebeden lineer olmayan kısmi türevli diferansiyel denklemdir. Aşağıda literatürde sık karşılaşılan bazı kısmi diferansiyel denklemler verilmiştir [29].

1. Adveksiyon Denklemi: $v_t + vv_z = f(z, t)$
2. Burgers Denklemi: $v_t + vv_z = \alpha v_{zz}$
3. Korteweg-de Vries Denklemi (KdV): $v_t + \alpha vv_z + \beta v_{zzz} = 0$
4. Modifiye KdV (mKdV) Denklemi: $v_t - 6v^2v_z + v_{zzz} = 0$
5. Boussinesq Denklemi: $v_{tt} - v_{zz} + 3(v^2)_{zz} - v_{zzz} = 0$
6. Sine-Gordon Denklemi: $v_{tt} - v_{zz} = \alpha \sin v$
7. Sinh-Gordon Denklemi: $v_{tt} - v_{zz} = \alpha \sinh v$
8. Liouville Denklemi: $v_{tt} - v_{zz} = e^{\pm v}$
9. Fisher Denklemi: $v_t = Dv_{zz} + v(1 - v)$
10. Kadomtsev-Petviashvili (KP) Denklemi: $(v_t + \alpha vv_z + \beta v_{zzz})_z + v_{yy} = 0$
11. $K(n, n)$ Denklemi: $v_t + \alpha(v^n)_z + \beta(v^n)_{zz} = 0$, $n > 1$
12. Lineer Olmayan Schrödinger Denklemi (NLS): $iv_t + v_{zz} + \gamma|v|^2v = 0$
13. Camassa-Holm Denklemi (CH): $v_t - v_{zzt} + \alpha v_z + 3vv_z = 2v_zv_{zz} + vv_{zzz}$
14. Degasperis-Procesi Denklemi (CH): $v_t - v_{zzt} + \alpha v_z + 4vv_z = 3v_zv_{zz} + vv_{zzz}$

2.2 Sayısal Yöntemler

Gerçek hayattaki uygulamaların çoğu, analitik olarak çözülemeyen denklemler ile modelenebilmektedir. Bu modellerin çözümlerini bulmak için sayısal yöntemler kullanılır. Ancak çok çeşitli mevcut yöntemler arasından nasıl bir yöntem seçileceği hala

açık bir problemidir. Klasik kriterler arasında doğruluk metrebesi, kararlılık ve uygulama kolaylığı uygulanacak yöntemi belirlemede önemli yer tutar. Sayısal yöntemlerin uygulanmasında temel fikir, sürekli bir problemi ayrık bir yapıya indirgemek ve böylece bilgisayar ortamında uygulanabilir hale getirmektir. Bu süreç genellikle ayrıklaştırma, lineerleştirme, iteratif yaklaşım teknikleri ve hata analizini içermektedir. Özellikle yüksek boyutlu, lineer olmayan veya kapalı form çözümü bulunmayan problemlerde sayısal yöntemler vazgeçilmezdir. Sayısal yöntemlerde temel amaç yalnızca yaklaşık çözüm üretmek değil, aynı zamanda bu yaklaşık çözümün güvenilirliğini ve doğruluğunu matematiksel olarak incelemektir. Bu bağlamda tutarlılık, kararlılık ve yakınsama kavramları merkezi bir rol oynar. Bir sayısal yöntemin teorik olarak sağlam kabul edilebilmesi için, üretilen ayrık çözümün sürekli probleme ait gerçek çözüme belirli normlar altında yakınsadığının gösterilmesi gerekir. Ayrıca, yuvarlama hataları ve kesme hataları gibi kaçınılmaz hesaplama hatalarının çözüm üzerindeki etkisi de analiz edilmelidir. Diferansiyel denklemler bağlamında sayısal yöntemler genellikle sonlu fark yöntemleri [26], sonlu eleman yöntemleri [27] ve spektral yöntemler [28] gibi ayrıklaştırma teknikleri üzerinden inşa edilir. Cebirsel denklem sistemlerinde ise doğrudan yöntemler ile iteratif yöntemler arasında bir ayrım yapılır. Büyük ölçekli problemlerde özellikle iteratif yöntemler ve ön koşullandırma teknikleri hesaplama maliyetinin azaltılması açısından kritik öneme sahiptir. Bunun yanında, lineer olmayan problemlerin çözümünde sabit nokta iterasyonları, Newton tipi yöntemler ve bunların modifiye edilmiş versiyonları yaygın olarak kullanılmaktadır. Günümüzde sayısal yöntemlerin önemi yalnızca teorik analizle sınırlı değildir; yüksek performanslı hesaplama tekniklerinin gelişimi ile birlikte büyük ölçekli ve çok boyutlu problemlerin çözümü mümkün hale gelmiştir. Bu durum, matematiksel modelleme ile sayısal algoritmaların birlikte ele alınmasını zorunlu kılmaktadır. Etkin bir sayısal yöntem, yalnızca matematiksel olarak yakınsayan bir şema olmakla kalmamalı; aynı zamanda hesaplama maliyeti, bellek kullanımı ve uygulama kolaylığı açısından da optimize edilmiş olmalıdır.

Yapı koruyan sayısal yöntemler, ayrıklaştırma sürecinde sistemin fiziksel yapısını koruyarak toplam enerji ve momentum gibi büyüklükleri sayısal çözüm boyunca muhafaza eder. Bu sayede uzun zaman simülasyonlarında ortaya çıkan yapay enerji artışı veya sönümlenme etkileri engellenir ve çözümün fiziksel tutarlılığı ile kararlılığı korunur.

Bu bölümde sayısal yöntemler hakkında temel bazı bilgiler verilecek ve tezin ilerleyen kısımlarında kullanılacak olan yöntemler tanıtılacaktır.

Teorem 1 (Picard-Lindelöf [58]).

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \geq t_0 \quad (2.3)$$

başlangıç değer problemi verilsin. $f(t, y)$ fonksiyonu (t_0, y_0) noktasını içeren kapalı bir dikdörtgen bölge $D = \{(t, y) : |t - t_0| \leq a, |y - y_0| \leq b\}$ üzerinde sürekli olsun ve y değişkenine göre Lipschitz koşulunu sağlasın yani; D içinde bir $L > 0$ sabiti için $D \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ ve $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ olmak üzere

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L|y_1 - y_2| \quad (2.4)$$

eşitsizliği geçerli olsun. Burada $L > 0$ reel bir sabittir ve bu sabite Lipschitz sabiti denir. Lipschitz koşulu sağlanıyorsa, adi diferansiyel denklem sistemi için tek bir çözüm vardır .

Picard–Lindelöf teoremi, başlangıç değer probleminin tek bir çözüme sahip olduğunu garanti eder. Ancak çoğu durumda bu çözümün analitik olarak elde edilmesi mümkün değildir. Bu nedenle, çözümün yaklaşık olarak elde edilmesi için sayısal yöntemlere ihtiyaç duyulur.

Teorem 2 (Taylor Teoremi [42]). $n \geq n_0$ bir tamsayı ve $f^{(n)}$ $[a, b]$ kapalı aralığında sürekli ve (a, b) açık aralığında yeteri kadar türevlenebilir olsun. Bu takdirde $x_0 \in [a, b]$ olmak üzere her $x_0 \in [a, b]$ için

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x) \quad (2.5)$$

olacak şekilde x ile x_0 arasında bir ξ vardır.

Burada

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \quad (2.6)$$

ve

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \quad (2.7)$$

olarak ifade edilir. $P_n(x)$ ifadesi n . mertebeden Taylor polinomu, $R_n(x)$ hata terimidir .

2.2.1 Sonlu Farklar Yöntemi

Sonlu farklar yönteminde sürekli formdaki türev terimlerinin ayrıklaştırılması, Taylor serisi açılımlarına dayanmaktadır. Bu yaklaşım doğrultusunda, bir fonksiyonun komşu düğüm noktalarındaki değerleri Taylor serisiyle ifade edilerek, sürekli türevler yerine sonlu fark formülasyonları türetilir. Açılımdaki yüksek mertebeden terimlerin ihmal edilmesi, yöntemin kesme hatasını ve doğruluk mertebesini belirler. Çözüm ağındaki veri noktalarının seçimine bağlı olarak ileri fark, geri fark ve merkezi fark şemaları elde edilerek diferansiyel denklem sistemi cebirsel bir forma dönüştürülür. Bu doğrultuda, fonksiyonun birinci ve ikinci mertebeden türevi için kullanılan sonlu fark yaklaşımları sırasıyla aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

Taylor seri açılımı ve birinci türev yaklaşımları:

$f(x)$ sürekli ve yeteri kadar türevlenebilen reel değerli bir fonksiyon olsun. $f(x + \Delta x)$ fonksiyonunun x etrafındaki Taylor açılımı

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) &= f(x) + (\Delta x) \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \\ &= f(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\Delta x)^n}{n!} \frac{d^n f}{dx^n} \end{aligned} \quad (2.8)$$

şeklinde yazılabilir. Buradan birinci türev çekilirse:

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{(\Delta x)}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} - \dots$$

ve hata terimi

$$O(\Delta x) = -\frac{(\Delta x)}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} - \dots$$

olmak üzere

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

yazılabilir. Bu ifade f büyüklüğünün x 'e göre birinci türevi için yapılmış birinci mertebeden bir yaklaşımdır. İndissel formda

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

şeklinde gösterilir ve türev için birinci mertebeden ileri fark formülasyonu olarak adlandırılır. Benzer şekilde $f(x - \Delta x)$ fonksiyonunun x etrafındaki Taylor açılımı

$$f(x - \Delta x) = f(x) - (\Delta x) \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (2.9)$$

şeklinde yazılarak indissel formda

$$\frac{df}{dx}|_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

yazılabilir. Bu da df/dx türevi için birinci mertebeden geri fark formülasyonudur. (2.8) denkleminde (2.9) denklemi çıkartılarak

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\Delta x \frac{df}{dx} + 2\frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots$$

bulunur. Benzer işlemlerle birinci türev indissel formda

$$\frac{df}{dx}|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2$$

yazılabilir. Böylece birinci türev için ikinci mertebeden merkezi fark formülasyonu elde edilir.

İkinci türev yaklaşımları:

$f(x + \Delta x)$ ve $f(x - \Delta x)$ ifadelerinin x etrafındaki Taylor açılımları

$$f(x + \Delta x) = f(x) + (\Delta x) \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (2.10)$$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - (\Delta x) \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (2.11)$$

şeklinde yazılabilir. (2.10) denklemi ile (2.11) denkleminde

$$f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x) = (\Delta x)^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + 2\frac{\Delta x^4}{4!} \frac{d^4 f}{dx^4} + \dots$$

yazılır ve buradan ikinci türev çekilirse

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

elde edilir. Bu bağıntı indissel formda yazılarak

$$\frac{d^2 f}{dx^2}|_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2)$$

şeklinde ikinci türev için ikinci basamaktan merkezi fark formülü elde edilir.

2.2.2 Tek Adım Yöntemleri

Bu bölümde

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad (2.12)$$

başlangıç değer problemi için tek adım yöntemleri ifade edilecektir. (2.12) denklemi için tek adım yöntemi genel olarak

$$y_{n+1} = y_n + h\psi(x_n, y_n, h) \quad (2.13)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $x_n = x_0 + n\Delta x, n = 0, 1, 2, \dots$ olup $\psi(x_n, y_n, h)$ fonksiyonu çözüm eğrisinin her bir adımda ilerleme yönünü belirleyen ve yöntemin yapısına bağlı olarak değişen gerçek türevin uygun bir yaklaşımıdır. x_n noktasındaki gerçek değer $y(x_n)$ olmak üzere (2.13) tek adım yöntemi için

$$y_{n+1} \approx y(x_n) + h\psi(x_n, y(x_n), h)$$

yaklaşımı yazılabilir. Genel olarak x_{n+1} noktasındaki hata gerçek çözüm ile nümerik çözüm arasındaki fark olan $y(x_{n+1}) - y_{n+1}$ 'dir. Buradan ϵ notasyonu hatayı temsil etmek üzere

$$\epsilon = y(x_{n+1}) - y_{n+1} - h\psi(x_n, y(x_n), h) \quad (2.14)$$

şeklinde formülize edilmektedir. (2.14) ifadesindeki terimlerin x_n etrafında Taylor açılımı yapıldığında kalan terimlere **yerel kesme hatası** denir. Tüm iterasyonlar boyunca yerel kesme hatalarının birikimi ise **global hata** olarak tanımlanır.

Tek adım yöntemleri farklı yaklaşımlar kullanılarak elde edilebilir. Bu yöntemlerden biri, (2.12) ile verilen başlangıç değer problemine kalkülüsün temel teoremi uygulanarak elde edilebilir. Bu amaçla, diferansiyel denklemin her iki tarafı $[t_n, t_{n+1}]$ aralığında integre edilerek başlangıç değer probleminin integral gösterimi elde edilir. Daha sonra bu integralin uygun yaklaşımlarla ayrıklaştırılması sonucunda tek adım yöntemlerine ait sayısal şemalar oluşturulur. Şimdi (2.12) denkleminde her iki tarafın $[t_n, t_{n+1}]$ aralığında integrali alınırsa

$$y(t+h) - y(t) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y(t+\tau))d\tau$$

bulunur. Sağ taraftaki integrali hesaplamak için Yamuk Kuralı ve Orta Nokta kuralı gibi uygun bir sayısal entegrasyon formülü yardımıyla tek adımlı yöntem elde edilmiş olur [42].

Açık Euler Yöntemi: (2.12) başlangıç değer problemi için açık Euler yöntemi

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) \quad (2.15)$$

şeklinde tanımlanır. Burada h adım uzunluğudur. Bu ifade $\varphi_h : y_n \rightarrow y_{n+1}$ ile gösterilebilir. Bu yöntemin kullanımı kolaydır ve her adım hızlıdır; çünkü herhangi bir lineer olmayan denklem çözümü gerekmemekte ve her adımda yalnızca bir fonksiyon değerlendirmesi yapılmaktadır [41].

Açık yöntemler, uygulanması basit olsa da kararlılık ve yakınsaklık gibi konularda, katı (stiff) diferansiyel denklemlerde olduğu gibi sayısal çözümde bazen yetersiz kalmaktadır. Stiff diferansiyel denklemler çözüme hızlı değişime yol açabilecek bazı terimler içerir. Çözümün bazı kısımları çok hızlı, bazıları ise çok yavaş değiştiği için sayısal çözümü zor olan denklemlerdir. Hızlı değişen bileşenler nedeniyle kararlılık için çok küçük adım boyutları gerektirirler. Bu da hesaplamaların verimsizleşmesine ve kullanıcı için uzun bekleme sürelerine sebep olur. Bu tip denklemleri çözmek için açık yöntemler yerine, örtük yöntemler gibi daha kararlı yöntemler kullanılmalıdır.

Kapalı Euler Yöntemi: (2.12) başlangıç değer problemi için Kapalı (implicit) Euler yöntemi

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_{n+1}, y_{n+1}) \quad (2.16)$$

şeklinde tanımlanır. Yöntem $y(x_{n+1}) \approx y_{n+1}$ bilinmeyenini denklemin her iki tarafında da içerdiğinden kapalı yöntem olarak adlandırılır. (2.12) probleminde vektör alanı f bağımlı değişken y 'ye göre eğer lineer değilse, karşımıza lineer olmayan bir denklem çıkar. Bu durumda y_{n+1} 'i bulmak için genellikle her adımda Newton-Raphson gibi iteratif bir yöntem kullanılır [41].

Kapalı Orta Nokta Yöntemi: (2.12) başlangıç değer problemi için orta nokta yöntemi

$$y_{n+1} = y_n + h f\left(\frac{x_n + x_{n+1}}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)\right) \quad (2.17)$$

şeklinde ifade edilebilir. Orta nokta yöntemi ikinci basamaktan simetrik bir yöntemdir [41].

Trapez Yöntemi: (2.12) başlangıç değer problemi için Trapez yöntemi

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] \quad (2.18)$$

eşitliği ile verilebilir. Trapez yöntemi simetrik kapalı bir yöntemdir.

Runge-Kutta Yöntemi: Runge-Kutta yöntemi Taylor serisi yönteminde karşılaşılan ardışık türev alma işini, türev hesaplama yerine türevi fonksiyon hesabı şeklindeki bir yaklaşımla kolaylaştıran yöntemdir. Literatürde Runge-Kutta yöntemi genel olarak şu şekilde ifade edilir.

Tanım 1. a_{ij}, b_i ($i, j = 1, \dots, s$) reel sayılar olsun ve

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$$

olarak tanımlansın. (2.12) başlangıç değer problemi için s -aşamalı bir Runge-Kutta yöntemi

$$k_i = f \left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, s$$

olmak üzere

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (2.19)$$

eşitliği ile ifade edilir [44].

Yukarıda bahsedilen (2.15) açık Euler, (2.16) kapalı Euler, (2.17) kapalı orta nokta ve (2.18) trapez yöntemleri uygun a_{ij} ve b_j sabitler altında (2.19) Runge-Kutta yöntemi şeklinde yazılabilir.

Simplektik Euler Yöntemi: Simplektik Euler yöntemi, açık ve kapalı Euler yöntemlerinin ikili denklem sistemlerine bir uygulamasıdır. Şöyle ki

$$\dot{u} = a(u, v), \quad \dot{v} = b(u, v)$$

sistemi için önce u için kapalı Euler yöntemi, ardından v için açık Euler yöntemi uygulanırsa

$$u_{n+1} = u_n + h a(u_{n+1}, v_n), \quad v_{n+1} = v_n + h b(u_{n+1}, v_n)$$

elde edilir. Tam tersine önce v için kapalı Euler yöntemi ve ardından u için açık Euler yöntemi uygulanırsa

$$u_{n+1} = u_n + h a(u_n, v_{n+1}), \quad v_{n+1} = v_n + h b(u_n, v_{n+1})$$

elde edilir [41]. Simplektik Euler yöntemi Hamilton sistemlere uygulanırsa, Hamilton sistemin simplektik yapısını koruduğu gösterilebilir [41].

2.2.3 Tek Adımlı Yöntemlerin Yakınsaklığı

Bu bölümde tek adım yöntemlerinin yakınsaklığı açıklanacaktır. Bunun için öncelikle yerel hatanın

$$\ell_e(h; \bar{y}) = \bar{\psi}_h(\bar{z}) - \varphi_h(\bar{y})$$

şeklinde ifade edildiğini varsayalım. Burada $\bar{\psi}_h(\bar{z})$ sayısal yöntemi, $\varphi_h(\bar{y})$ ise tam çözümü göstermektedir. Genel olarak

$$\|\ell_e(h; \bar{y})\| \leq c(y)h^{p+1}$$

sonucuna ulaşılabilir. Ayrıca

$$\|\bar{\psi}_h(u) - \bar{\psi}_h(v)\| \leq (1 + h\hat{L})\|u - v\| \quad (2.20)$$

eşitliği yazılabilir. Burada $\hat{L}$ sabiti genel olarak vektör alanının Lipschitz sabiti ile aynı değildir. Buna göre,

$$\varepsilon_{n+1} = y_{n+1} - y(t_{n+1}) = \bar{\psi}_h(y_n) - \varphi_h(y(t_n)) \quad (2.21)$$

hata teriminden

$$\begin{aligned} \|\varepsilon_{n+1}\| &= \|\bar{\psi}_h(y_n) - \bar{\psi}_h(y(t_n)) + \bar{\psi}_h(y(t_n)) - \varphi_h(y(t_n))\| \\ &\leq \|\bar{\psi}_h(y_n) - \bar{\psi}_h(y(t_n))\| + \|\bar{\psi}_h(y(t_n)) - \varphi_h(y(t_n))\| \\ &\leq (1 + h\hat{L})\|y_n - y(t_n)\| + c(y(t_n))h^{p+1} \\ &= (1 + h\hat{L})\|\varepsilon_n\| + c(y(t_n))h^{p+1} \\ &\leq (1 + h\hat{L})\|\varepsilon_n\| + \bar{c}h^{p+1} \end{aligned} \quad (2.22)$$

elde edilir. Ayrık Gronwall Lemması kullanılarak, global hata için

$$\|\varepsilon_n\| \leq \frac{\bar{c}h^{p+1}}{k-1}(k^n - 1) + k^n\|\varepsilon_0\| \leq \frac{\bar{c}h^p}{L}(e^{T\hat{L}} - 1) \quad (2.23)$$

eşitsizliği elde edilir. Buradan

$$\max_{n=0,\dots,N} \|\varepsilon_n\| = O(h^p) \quad (2.24)$$

sonucunu ulaşırlar ki adım büyüklüğü $h \rightarrow 0$ için $\varepsilon \rightarrow 0$ yakınsaklığı gösterilmiş olur.

2.3 Enerji Koruyan Sayısal Yöntemler

Diferansiyel denklem sistemlerinin sayısal çözümlerini elde etmek için çok çeşitli yöntemler mevcuttur; ancak uygun bir yöntemin seçimi kolay değildir. Yöntemler genellikle

- (a) doğruluk metrebesi
- (b) kararlılık özellikleri
- (c) kodun bulunabilirliği veya uygulama kolaylığı

bakımından ele alınırlar. Sayısal yöntemlerde kararlılık yakınsaklık kadar önemli bir adımdır, çünkü adi türevli diferansiyel denklem sistemleri ve özellikle kısmi diferansiyel denklemlerin ayrıklaştırılmasından kaynaklı çözüm patlamaları yaşanabilmektedir. Bu nedenle, özellikle açık bir şema seçilirken, zaman ayrıklaştırılmasında adım boyutu çok daha küçük olmalıdır, aksi takdirde sayısal şema kararsız hale gelir [31]. Ancak sadece kararlılık ve yakınsaklık sayısal yöntem belirmeme konusunda yeterli değildir. Diferansiyel denklemlerin Hamilton sistemlerinin hamiltonu koruması gibi bazı korunum özellikleri vardır. Dördüncü basamaktan Runge-Kutta yöntemi gibi yüksek basamaktan yöntemler kullanılsa bile yapı korunum özelliği olmayan yöntemler uygulandığında sayısal bir çözüm elde edilebilir ancak denklemin korunum yasaları ihmal edilmiş olur. İşte bu nedenle denklemin öyle bir ayrıklaştırılması gerekir ki denklemin sayısal çözümü elde edilirken korunum yasaları da korunsun. İşte bu tür sayısal yöntemlere geometrik sayısal yöntemler denilir. Geometrik sayısal yöntemler enerji koruyan ve/veya kütle koruyan sayısal yöntemler gibi denklemin ayrık özelliklerini korumasına göre adlandırılır. Bu bölümde adi türevli hamilton diferansiyel denklemlerde ayrık enerjiyi koruyan Ortalama Vektör Alanı (OVA) ve Bölünmüş Ortalama vektör Alanı (BOVA) yöntemleri ele alınacaktır.

2.3.1 Ortalama Vektör Alanı Yöntemi

OVA yöntemi adi türevli diferansiyel denklemlerin sayısal çözümünde kullanılan bir yöntemdir. Adi türevli diferansiyel denklemde sağ taraf yanı vektör alanı lineer ise OVA yöntemi bilinen Kapalı Orta- Nokta (Implicit Mid-Point) yöntemine indirgenmiş olur. Yöntem adi türevli Hamilton diferansiyel denklem uygulandığında ayrık

Hamilton tam olarak korunur. Son yıllarda lineer olmayan Schrödinger denklemi, Sine-Gordon denklemi, Korteweg-de Vries denklemi gibi bir çok kısmi türevli diferansiyel denklemlerin sayısal çözümlerinde [9], Poisson sistemi olarak ifade edilmiş Volterra lattice denkleminin çözümünde [32] ve bi-Hamilton formunda yazılmış KdV denkleminin çözümünde [33] OVA yönteminin kullanıldığı görülmektedir.

$$y' = f(y), \quad y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^n \quad (2.25)$$

adi diferansiyel denklem sistemi göz önüne alalım. Δt ayrık sistemde t değişkeni için adım uzunluğunu göstermek üzere (2.25) denklemi için ikinci mertebeden OVA yöntemi [34]

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \int_0^1 f((1 - \xi)y_n + \xi y_{n+1}) d\xi \quad (2.26)$$

eşitliği ile verilebilir. Özel olarak, vektör alanı $f(y) = y$ ise, OVA yöntemi

$$\int_0^1 f((1 - \xi)y_n + \xi y_{n+1}) d\xi = \frac{y_{n+1} + y_n}{2} \quad (2.27)$$

ile ifade edilen Kapalı Orta-Nokta kuralına eşittir.

Eğer vektör alanı $f(y) = J(y)H(y)$ ise, yani Hamilton sistem (2.36) bir Poisson sistem ise bu durumda OVA yöntemi

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{h} = J\left(\frac{y^n + y^{n+1}}{2}\right) \bar{\nabla} H(y^n, y^{n+1}) \quad (2.28)$$

şeklinde [35, 36]. Burada $\bar{\nabla} H$ ayrık gradyant olarak adlandırılır ve şu şekilde tanımlanır:

Tanım: $H : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ türevlenebilen bir fonksiyon (d pozitif bir tamsayıdır), $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ise $\mathbb{R}^{2d}$ de standart iç çarpım olsunlar. Bu durumda sürekli $\bar{\nabla} H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ fonksiyonu aşağıdaki şartları sağlıyorsa ayrık gradyant denir [36]:

1. $\langle \bar{\nabla} H(z^n, z^{n+1}), z^n - z^{n+1} \rangle = H(z^n) - H(z^{n+1})$, her $z^n, z^{n+1} \in \mathbb{R}^d$ için
2. $\bar{\nabla} H(z^n, z^n) = \nabla H(z^n)$, her $z^n \in \mathbb{R}^d$ için.

Örneğin

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

bir ayrık gradyanttır [36].

Eğer (2.25) denkleminde, $y \in \mathbb{R}^d$, J $d \times d$ anti-simetrik sabit matris ve $H(y)$ yeteri kadar türevlenebilen Hamilton fonstiyon olmak üzere $f(y) = J\nabla H(y)$ ise, OVA yöntemi (2.26)

$$\begin{aligned} \frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} &= \int_0^1 f((1 - \xi)y_n + \xi y_{n+1}) d\xi \\ &= J \int_0^1 \nabla H((1 - \xi)y_n + \xi y_{n+1}) d\xi \end{aligned} \quad (2.29)$$

şeklinde yazılır. Kalkülüsün temel teoremi ve J matrisinin anti-simetrik matris özelliğinden yararlanılarak, (2.29) ayrık sistemin

$$H(y_n) = H(y_{n-1}) = \dots = H(y_1) = H(y_0) \quad (2.30)$$

ayrık Hamiltonu tam olarak koruduğu gösterilebilir [36].

2.3.2 Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Yöntemi

Bu bölümde (2.36) Hamilton sistemi için birinci mertebeden bir adımlı Bölünmüş Ortalama vektör Alanı (BOVA) yöntemi ele alınacaktır. $z = (p, q)^T = (z_1, z_2, \dots, z_d; z_{d+1}, z_{d+2}, \dots, z_m)^T$ olmak üzere (2.36) Hamilton sistemi

$$\begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} H_p(p, q) \\ H_q(p, q) \end{pmatrix}, \quad p, q \in \mathbb{R}^d \quad (2.31)$$

şeklinde ifade edilebilir. (2.31) Hamilton sistemi için BOVA yöntemi

$$\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} p^{n+1} - p^n \\ q^{n+1} - q^n \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \int_0^1 H_p(\xi p^{n+1} + (1-\xi)p^n, q^n) d\xi \\ \int_0^1 H_q(p^{n+1}, \xi q^{n+1} + (1-\xi)q^n) d\xi \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

şeklindedir [56].

Teorem 3. *Bölinmüş ortalama vektör alanı yöntemi (2.32) Hamiltonu tam olarak korur [56]. Bir başka deyişle*

$$H(p^n, q^n) = H(p^{n-1}, q^{n-1}) = \dots = H(p^0, q^0)$$

eşitliği he zaman sağlanır.

İspat: (2.32) eşitliğinin her iki tarafının

$$\left(\int_0^1 H_p(\xi p^{n+1} + (1-\xi)p^n, q^n)^T d\xi, \int_0^1 H_q(p^{n+1}, \xi q^{n+1} + (1-\xi)q^n)^T d\xi \right)^T$$

ile iç çarpımı alınırsa kalkülüsün temel teoreminden ve J matrisinin antisimetrik matris özelliğinden

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\tau} \int_0^1 H_p(\xi p^{n+1} + (1-\xi)p^n, q^n)^T d\xi (p^{n+1} - p^n) \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^1 H_q(p^{n+1}, \xi q^{n+1} + (1-\xi)q^n)^T d\xi (q^{n+1} - q^n) \\ &= \frac{1}{\tau} \int_0^1 \frac{d}{d\xi} \left[H(\xi p^{n+1} + (1-\xi)p^n, q^n) + H(p^{n+1}, \xi q^{n+1} + (1-\xi)q^n) \right] d\xi \\ &= \frac{1}{\tau} \left[H(p^{n+1}, q^n) - H(p^n, q^n) + H(p^{n+1}, q^{n+1}) - H(p^{n+1}, q^n) \right] \\ &= \frac{1}{\tau} (H(p^{n+1}, q^{n+1}) - H(p^n, q^n)) = 0 \end{aligned}$$

elde edilir. Burada

$$H(p^{n+1}, q^{n+1}) = H(p^n, q^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

sonucunu ulaşılr.

2.3.3 Ek, Bileşke ve Toplam Yöntemleri

OVA yönteminden farklı olarak BOVA yöntemi ile ilişkili "Ek Yöntem" (Adjoint method), "Bileşke yöntemi" (Composition method) ve "Toplam Yöntem" (Plus method) olarak adlandırılabilen üç yöntem daha tanımlanabilmektedir.

Ayrık yöntemde adım uzunluğu Δt ile gösterilirsin. Bölünmüş ortalama vektör alanı yöntemi (2.32) $\Phi_{\Delta t}$ ile gösterilmek üzere Ek yöntem

$$\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} p^{n+1} - p^n \\ q^{n+1} - q^n \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \int_0^1 H_p(\xi p^{n+1} + (1-\xi)p^n, q^{n+1}) d\xi \\ \int_0^1 H_q(p^n, \xi q^{n+1} + (1-\xi)q^n) d\xi \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

ile tanımlanır ve $\Phi_{\Delta t}^*$ ile gösterilir. Ek yöntem (2.33), BOVA yöntemi gibi Hamiltonu korur ve BOVA yönteminin bütün özelliklerine sahiptir.

BOVA yöntemi ile bağlantılı olan bir diğer yöntem

$$\psi_{\Delta t} := \Phi_{\frac{\Delta t}{2}}^* \circ \Phi_{\frac{\Delta t}{2}} \quad (2.34)$$

ise BOVA bileşke yöntemi (BOVA-B)'dir [56]. Bu yöntemde önce BOVA yöntemi $\Delta t/2$ adımda çalıştırılır ve bunun sonuçları Ek yöntem başlangıç değeri olarak verilir ve Ek yöntem $\Delta t/2$ adımda tekrar çalıştırılır. Bu şekilde birinci basamaktan bir yöntem olan BOVA yöntemi ikinci basamaktan bir yöntemeye yükseltilmiş olur.

BOVA yöntemi ile bunun Ek yönteminin ortalaması BOVA Toplam (BOVA-T) yöntemi olarak adlandırılır ve

$$\tilde{\psi}_{\Delta t} := \frac{1}{2} (\Phi_{\Delta t}^* + \Phi_{\Delta t}) \quad (2.35)$$

eşitliği ile ifade edilir [56].

2.4 Sonsuz ve Sonlu Boyutlu Hamilton Sistemler

Sonlu boyutlu Hamilton sistemleri, Adi Diferansiyel Denklemler (ODE'ler) kullanarak sonlu sayıda serbestlik derecesine (degree of freedom) sahip sistemleri modellerken, sonsuz boyutlu Hamilton sistemler ise, sonsuz boyutlu fonksiyon uzayları üzerinde Kısmi Diferansiyel Denklemler (PDE'ler) kullanarak sürekli alanları veya akışkanları modeller.

Sonlu boyutlu bir Hamilton sistem dinamik bir sistemi toplam enerjisine göre tanımlayan matematiksel temel bir kavramdır. Hamilton denklemleriyle yönetilen sistemler, zaman içinde enerjiyi ve faz uzayı hacmini koruyan sistemlerdir.

Bağımlı değişken $y = (p, q) \in \mathbb{R}^{2d}$, Hamilton fonksiyon $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ ve

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}$$

antisimetrik bir matris ($J^T = -J$) olmak üzere sonlu boyutlu bir Hamilton adi türevli diferansiyel denklem sistemi

$$\frac{dy}{dt} = J^{-1} \nabla H(y) \quad (2.36)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ∇ operatörü $y = (p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d)$ değişkenlerine göre birinci mertebeden türevleri ifade etmektedir. Bu durumda

$$\dot{p}_i = \frac{dp_i}{dt}, \quad \dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, d \quad (2.37)$$

olmak üzere (2.36) sistemi

$$\dot{p}_i = -H_{q_i}(p_i, q_i), \quad \dot{q}_i = H_{p_i}(p_i, q_i), \quad i = 1, \dots, d \quad (2.38)$$

olarak yazılabilir. $H = H(p_i, q_i)$ Hamilton fonksiyonun zaman değişkenine göre türevi alınır

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) = \sum_{i=1}^d \left(-\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) = 0$$

elde edilir. Bir başka deyişle

$$H(p_i(t), q_i(t)) = C, \quad C \in \mathbb{R}$$

olup Hamilton zamana bağlı olarak değişmez [30].

Örnek 1. *Av-avcı ilişkilerini yöneten Lotka-Volterra denklemleri aşağıdaki formda verilir:*

$$\dot{x} = (A - By)x, \quad \dot{y} = (Cx - D)y \quad (2.39)$$

Burada A, B, C ve D pozitif sabitlerdir. Sistemin vektör alanı incelendiğinde;

$$X = (A - By)x \frac{\partial}{\partial x} + (Cx - D)y \frac{\partial}{\partial y} \quad (2.40)$$

ifadesinin diverjansının sıfır olmadığı görülür. Dolayısıyla, Hamilton yapının varlığı için kullanılan naif kriter bu sistemde başarısız olur. Diğer taraftan, iki boyutta her zaman kapalı olan aşağıdaki simplektik form ele alınırsa:

$$\omega = f(x, y)dx \wedge dy \quad (2.41)$$

dir. Hamilton denklemleri

$$\omega \rfloor X = dH \quad (2.42)$$

şartını sağlamalıdır. Burada H bir sıfır-formdur (Hamilton fonksiyonu). Denklem (2.42)'un integrallenebilirlik koşulları dış türev uygulanarak elde edilir. Buna göre f fonksiyonunun aşağıdaki birinci mertebeden denklemi sağlaması durumunda ω simplektik bir form olur:

$$[(A - By)xf]_x + [(Cx - D)yf]_y = 0 \quad (2.43)$$

Bu denklemin çözümü şu şekildedir:

$$f = \frac{1}{xy} \quad (2.44)$$

Bu çözümden hareketle, aynı zamanda sistem için bir Liapunov fonksiyonu olan Hamilton fonksiyonu elde edilir:

$$H = A \ln y + D \ln x - Cx - By \quad (2.45)$$

Sistemin dinamikleri, dual temsil bağlamında genelleştirilmiş Poisson parantezi kullanılarak şu formda ifade edilebilir:

$$\dot{x}^i = J^{ik} \nabla_k H \quad (2.46)$$

Burada $x^1 = x$ ve $x^2 = y$ olarak tanımlanmıştır. Yapı fonksiyonlarını içeren J matrisi ise şu şekildedir:

$$J = \begin{pmatrix} 0 & xy \\ -xy & 0 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

Bu yapının tutarlı bir Poisson yapısı tanımlayabilmesi için gerekli olan Jacobi özdeşlikleri:

$$J^{k[m} \nabla_k J^{np]} = 0 \quad (2.48)$$

koşulunu gerektirir. Sistem iki boyutlu olduğu için bu özdeşlikler otomatik olarak sağlanmaktadır. Bu sonuç, Lotka-Volterra denklemlerinin bir Hamilton sistem olduğunu kanıtlar.

Sonsuz boyutlu bir Hamilton kısmi türevli denklem $\Omega = (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ tanım kümesinde

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{J} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \quad (2.49)$$

eşitliği ile tanımlanır. Burada

$$\mathcal{H}[u] = \int_{\Omega} H(x; u, u_x, u_{xx}, \dots) dx,$$

$\mathcal{J}$ sabit lineer türev operatörü olup, homojen sınır koşulları altında varyasyonel türev

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u}[u] = \frac{\partial H}{\partial u} - \partial_x \left(\frac{\partial H}{\partial u_x} \right) + \partial_{xx} \left(\frac{\partial H}{\partial u_{xx}} \right) - \dots$$

ile tanımlanır [9].

Örnek 2. $\Phi(-20, t) = \Phi(20, t)$ periyodik sınır koşulu ile Sine-Gordon diferansiyel denklemi

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \frac{\partial \Phi}{\partial x^2} - c \sin(\Phi) \quad (2.50)$$

şeklinde. Denklem, Hamilton

$$H = \int \left[\frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + c(1 - \cos(\Phi)) \right] dx$$

ve Hamilton operatörü $\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ olmak üzere

$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{J} \frac{\delta H}{\delta u}$ şeklinde Hamilton sistem olarak yazılabilir. Burada $u = \begin{pmatrix} \Phi \\ \pi \end{pmatrix}$ ve $\pi = \frac{\partial \Phi}{\partial t}$ dir.

2.4.1 Bir Boyutlu Lineer Olmayan Schrödinger Denklemi

Lineer olmayan Schrödinger (NLS) denklemi, kuantum mekaniği, lineer olmayan optik, plazma fiziği ve Bose-Einstein yoğunlaşmaları gibi birçok fiziksel sistemde dalga yayılımının modellenmesinde kullanılan temel kısmi diferansiyel denklemlerden biridir. Denklem, dalga fonksiyonunun uzay ve zamana bağlı evrimini tanımlarken, lineer olmayan terim ortamın lineer olmayan etkilerini ifade etmektedir.

NLS denklemi, $\psi = \psi(x, t)$ kompleks fonksiyon ve $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ başlangıç koşulu ve $\psi(x_L, t) = \psi(x_R, t)$ periyodik sınır koşulu ile

$$i\psi_t + \psi_{xx} + \lambda|\psi|^2\psi = 0, \quad x \in [x_L, x_R] \subset \mathbb{R}, 0 < t \leq T, \lambda > 0 \quad (2.51)$$

eşitliği ile verilebilir. Burada $\psi(x, t)$ kompleks değerli dalga fonksiyonunu, x uzaysal değişkeni ve t zamanı göstermektedir. Denklemden yer alan ψ_t terimi dalga fonksiyonunun zamana göre değişimini, ψ_{xx} terimi ise dispersiyonu, yani dalganın uzayda yayılma davranışını temsil etmektedir. $\lambda|\psi|^2\psi$ lineer olmayan terimi ise dalganın kendisiyle olan etkileşimini modellemektedir. Bu çalışmada $\lambda > 0$ parametresi lineer olmayan etkileşimin şiddetini belirlemektedir.

NLS denklemi (2.51) sonsuz boyutlu Hamilton denklem şeklinde ifade edilebilir. $p = p(x, t)$, $q = q(x, t)$ reel değerli fonksiyonlar olmak üzere ψ kompleks değerli fonksiyonu $\psi = p + iq$ olarak ifade edilirse (2.51) denklemi

$$\begin{aligned} p_t + q_{xx} + \lambda(p^2 + q^2)q &= 0 \\ -q_t + p_{xx} + \lambda(p^2 + q^2)p &= 0 \end{aligned} \quad (2.52)$$

şeklinde reel değerli iki denklem sistemi şeklinde ifade edilmiş olur. Hamilton fonksiyonu

$$\mathcal{H}[x; p, q, p_x, q_x] = \int_{x_L}^{x_R} \frac{1}{2} \left[\frac{\lambda}{2} (p^2 + q^2)^2 - \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 \right] dx \quad (2.53)$$

olmak üzere (2.52) sistemi

$$p_t = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q}, \quad q_t = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta p}$$

şeklinde yazılabilir. Bir başka deyişle $z = (p, q)^T$ ve antisimetrik matris J

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

olma üzere (2.51), NLS denklemi (2.49) sonsuz boyutlu Hamilton sistemi

$$\dot{z} = \mathcal{J}^{-1} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta z}$$

eşitliği ile ifade edilebilir.

Kısmi türevlere sahip (2.52) NLS denkleminde $p_{xx}(x, t)$ ve $q_{xx}(x, t)$ kısmi türevleri sonlu fark şemaları ile ayrıştırılarak, denklem adi türevli diferansiyel denklem sistemi şeklinde yazılabilir. Uygun ayrıştırılma kullanılırsa elde edilen sistem sonlu boyutlu Hamilton sistem (2.36) şeklinde de yazılabilir.

Ayrık noktalar $x_j = x_L + jh$, $j = 0, 1, \dots, N$, ve $h = \Delta x = L/N$, $L = x_R - x_L$ olsun.

$$\begin{cases} p_j = p(x_j, t) \\ q_j = q(x_j, t) \end{cases}$$

olarak tanımlayalım. Şimdi (2.52) denkleminde p_{xx} ve q_{xx} türevlerini ikinci mertebeden merkezi fark tasarısı kullanarak ayrıklaştıralım

$$\begin{aligned} p_{xx} &= \frac{1}{\Delta x^2} (p_{j-1} - 2p_j + p_{j+1}), \\ q_{xx} &= \frac{1}{\Delta x^2} (q_{j-1} - 2q_j + q_{j+1}), j = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Bu durumda (2.52) sistemi

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

olmak üzere

$$\begin{aligned} \dot{p}_j &= \frac{dp_j}{dt} = -Aq_j - \lambda q_j (p_j^2 + q_j^2), \\ \dot{q}_j &= \frac{dq_j}{dt} = Ap_j + \lambda p_j (p_j^2 + q_j^2) \end{aligned} \tag{2.54}$$

şeklinde yazılabilir. Bu sistem

$$H = \frac{1}{2\Delta x^2} \sum_{j=1}^N [(p_{j+1} - p_j)^2 + (q_{j+1} - q_j)^2] - \frac{\lambda}{4} \sum_{j=1}^N (p_j^2 + q_j^2)^2$$

ve

$$J = \begin{pmatrix} 0_N & -I_N \\ I_N & 0_N \end{pmatrix}$$

olmak üzere (2.36) sonlu boyutlu Hamilton sistem şeklinde ifade edilebilir. Burada 0_N ve I_N sırasıyla $N \times N$ sıfır ve birim matrislerdir.

2.4.2 Lineer Olmayan İkili Schrödinger Denklemi

Lineer olmayan ikili Schrödinger denklemi sistemi, birbirleriyle etkileşim halinde bulunan iki dalga alanının zamana bağlı davranışını modellemek amacıyla kullanılmak-

tadır. Bu tür sistemler özellikle iki bileşenli Bose–Einstein yoğuşmaları, çift kutuplanmalı optik fiberler ve çok bileşenli lineer olmayan optik problemlerinde ortaya çıkmaktadır. $\psi_1(x, t)$ ve $\psi_2(x, t)$ kompleks fonksiyonlar ve $\psi_1 = \psi_1(x, t)$ ve $\psi_2 = \psi_2(x, t)$ olmak üzere ikili NLS denklem sistemi

$$\begin{aligned} i\psi_{1t} + \alpha_1\psi_{1xx} + (\sigma_1|\psi_1|^2 + \mu|\psi_2|^2)\psi_1 &= 0 \\ i\psi_{2t} + \alpha_2\psi_{2xx} + (\sigma_2|\psi_2|^2 + \mu|\psi_1|^2)\psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (2.55)$$

şeklindedir. Burada $\psi_1(x, t)$ ve $\psi_2(x, t)$ kompleks değerli iki dalga fonksiyonunu temsil etmektedir. α_1 ve α_2 parametreleri her iki bileşenin dispersiyon katsayılarını ifade ederken, σ_1 ve σ_2 parametreleri her bileşenin kendi lineer olmayan öz etkileşiminin şiddetini belirlemektedir. μ parametresi ise iki dalga bileşeni arasındaki çapraz etkileşim kuvvetini temsil etmektedir. Böylece sistem, hem her dalga bileşeninin kendi dinamiğini hem de bileşenler arasındaki karşılıklı etkileşimi birlikte modellemektedir. İkili NLS denklem sistemin lineer olmayan optik ve jeofizik akış dinamiği gibi çeşitli uygulamaları vardır. Analitik çözümler bazı integrallenebilir durumlarda elde edilir. Bunlardan biri $\alpha_1 = \alpha_2 = 1, \sigma_1 = \sigma_2 = \mu$ olması durumunda yani Manakov modelidir, diğer bir model ise $\alpha_1 = -\alpha_2, \sigma_1 = \sigma_2 = -\mu$ olmasıdır bu durumda, ters saçılım dönüşüm yöntemi ile çözüm elde edilir. Lineer olmayan ikili NLS denkleminin sayısal çözümleri üzerine literatürde yapılmış bir çok çalışma vardır. Özellikle son yıllarda denklemin simplektik ve çoklu simplektik yapısına bağlı olarak simplektik ve çoklu simplektik sayısal yöntemler, sonlu fark yöntemleri ve sürekli olmayan Galerkin yöntemi, bu denklemin sayısal çözümü için yapılmış önemli çalışmalar olarak gösterilebilir (bkz. [38, 39, 40] ve referansları).

$p = p(x, t)$, $q = q(x, t)$, $u = u(x, t)$, $v = v(x, t)$ reel değerli fonksiyonlar ve $\psi_1 = p + iq$ ve $\psi_2 = u + iv$ olmak üzere lineer olmayan ikili NLS denklem sistemi (2.55)

$$\begin{aligned} p_t + \alpha_1 q_{xx} + (\sigma_1(p^2 + q^2) + \mu(u^2 + v^2))q &= 0 \\ q_t - \alpha_1 p_{xx} - (\sigma_1(p^2 + q^2) + \mu(u^2 + v^2))p &= 0 \\ u_t + \alpha_2 v_{xx} + (\mu(p^2 + q^2) + \sigma_2(u^2 + v^2))v &= 0 \\ v_t - \alpha_2 u_{xx} - (\mu(p^2 + q^2) + \sigma_2(u^2 + v^2))u &= 0 \end{aligned} \quad (2.56)$$

şeklinde yazılabilir.

$$w = \frac{1}{4} \left(\sigma_1 (p^2 + q^2)^2 + \sigma_2 (u^2 + v^2)^2 \right) + \frac{\mu}{2} (p^2 + q^2) (u^2 + v^2)$$

olmak üzere Hamilton

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} \left[w - \frac{\alpha_1}{2} (p_x^2 + q_x^2) - \frac{\alpha_2}{2} (u_x^2 + v_x^2) \right] dx \quad (2.57)$$

şeklinde alınırsa

$$\begin{aligned} \frac{\delta H}{\delta p} &= \alpha_1 p_{xx} + (\sigma_1 (p^2 + q^2) + \mu (u^2 + v^2)) p \\ \frac{\delta H}{\delta q} &= \alpha_1 q_{xx} + (\sigma_1 (p^2 + q^2) + \mu (u^2 + v^2)) q \\ \frac{\delta H}{\delta u} &= \alpha_2 u_{xx} + (\mu (p^2 + q^2) + \sigma_2 (u^2 + v^2)) u \\ \frac{\delta H}{\delta v} &= \alpha_2 v_{xx} + (\mu (p^2 + q^2) + \sigma_2 (u^2 + v^2)) v \end{aligned} \quad (2.58)$$

eşitliklerinden (2.56) denklemi

$$p_t = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta q}, \quad q_t = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta p}, \quad u_t = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta v}, \quad \text{ve } v_t = \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}$$

şeklinde yazılabilir. Böylece $z = (p, q, u, v)^T$ ve

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

olmak üzere (2.56) sistemi kısmi türevli Hamilton sistemi (2.49) şeklinde yazılabilir.

Bir boyutlu NLS denkleminde (2.51) olduğu gibi (2.56) lineer olmayan ikili NLS denkleminde, ikinci mertebe kısmi türevler, ikinci mertebeden merkezi fark tasarısı kullanılarak ayrıklaştırılırsa (2.56) denklem sistemi

$$\begin{aligned} \frac{dp_j}{dt} &= -\alpha_1 A q_j - \sigma_1 (p_j^2 + q_j^2) q_j - \mu (u_j^2 + v_j^2) q_j \\ \frac{dq_j}{dt} &= \alpha_1 A p_j + \sigma_1 (p_j^2 + q_j^2) p_j + \mu (u_j^2 + v_j^2) p_j \\ \frac{du_j}{dt} &= -\alpha_2 A v_j - \sigma_2 (u_j^2 + v_j^2) v_j - \mu (p_j^2 + q_j^2) v_j \\ \frac{dv_j}{dt} &= \alpha_2 A u_j + \sigma_2 (u_j^2 + v_j^2) u_j + \mu (p_j^2 + q_j^2) u_j, \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (2.59)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 1 & & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

matrisidir. Sonuç olarak ayrık Hamilton

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{H}} = & \sum_{m=1}^{N-1} \left\{ \frac{1}{4} \left[\sigma_1 (p_m^2 + q_m^2)^2 + \sigma_2 (u_m^2 + v_m^2)^2 \right] + \frac{\mu}{2} (p_m^2 + q_m^2) (u_m^2 + v_m^2) \right\} \\ & - \sum_{m=1}^{N-1} \frac{\alpha_1}{2} \left[\left(\frac{p_{m+1} - p_m}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{q_{m+1} - q_m}{\Delta x} \right)^2 \right] \\ & - \sum_{m=1}^{N-1} \frac{\alpha_2}{2} \left[\left(\frac{u_{m+1} - u_m}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{v_{m+1} - v_m}{\Delta x} \right)^2 \right],\end{aligned}$$

ve

$$J = \begin{pmatrix} 0_N & I_N & 0_N & 0_N \\ -I_N & 0_N & 0_N & 0_N \\ 0_N & 0_N & 0_N & I_N \\ 0_N & 0_N & -I_N & 0_N \end{pmatrix}$$

olmak üzere, lineer olmayan ikili Schrödinger denklemi (2.56), sonlu boyutlu Hamilton sistem (2.36) şeklinde yazılabilir.

Bölüm 3

KOMPAKT YÖNTEM

Kompakt sonlu fark yöntemleri bir tür sonlu fark sayısal bir yöntemdir. Kompakt sonlu fark yaklaşımının formülasyonunda, komşu noktaların türevlerinin de etkisi hesaplamaya dahil edilir [46]. Fonksiyonun türevinin tahmininde rastgele bir noktada meydana gelen bir değişiklik, türevlerin geri kalan tahminlerini etkiler. Şema tüm noktalara uygulandığında ve tüm bilinmeyenler için aynı anda çözüldüğünde, elde edilen kompakt şemalar genel olarak kapalı yöntem olarak karşımıza çıkar. Bir $f(x)$ fonksiyonun değerleri $a \leq x \leq b$ aralığında N pozitif bir tamsayı ve adım uzunluğu

$$h = \frac{b - a}{N - 1}$$

olmak üzere

$$x_i = a + h(i - 1), \quad 1 \leq i \leq N,$$

noktalarında verilmiş olsun. Düğümlerdeki fonksiyon değerleri basitlik olması açısından $f_i = f(x_i)$ ile gösterilsin.

Bu bölümde Kompakt sayısal yöntemlerin nasıl oluşturulduğu hakkında temel bilgiler verilecektir (bkz. [45], 22.Bölüm)

3.1 Birinci Basamaktan Türev için Kompakt Sonlu Fark Tasarısı

Birinci türev içeren üç noktalı

$$H_i = \sum_{m=-1}^1 (a_m f_{i+m} + b_m f'_{i+m}) = 0 \quad (3.1)$$

ya da

$$a_{-1} f_{i-1} + a_0 f_i + a_1 f_{i+1} + b_{-1} f'_{i-1} + b_0 f'_i + b_1 f'_{i+1} = 0 \quad (3.2)$$

Hermite ifadesi ele alınsın. Tüm fonksiyon değerlerinin x_i noktası etrafında Taylor serisi açılımı yapılırsa (3.2) denklemi

$$\begin{aligned} & a_{-1} \left[f_i - h f'_i + \frac{h^2}{2!} f''_i - \frac{h^3}{3!} f'''_i + \frac{h^4}{4!} f^{(iv)}_i - \frac{h^5}{5!} f^{(v)}_i + \frac{h^6}{6!} f^{(vi)}_i + O(h^7) \right] + a_0 f_i \\ & + a_1 \left[f_i + h f'_i + \frac{h^2}{2!} f''_i + \frac{h^3}{3!} f'''_i + \frac{h^4}{4!} f^{(iv)}_i + \frac{h^5}{5!} f^{(v)}_i + \frac{h^6}{6!} f^{(vi)}_i + O(h^7) \right] \\ & + b_{-1} \left[f'_i - h f''_i + \frac{h^2}{2!} f'''_i - \frac{h^3}{3!} f^{(iv)}_i + \frac{h^4}{4!} f^{(v)}_i - \frac{h^5}{5!} f^{(vi)}_i + O(h^6) \right] + b_0 f'_i \\ & + b_1 \left[f'_i + h f''_i + \frac{h^2}{2!} f'''_i + \frac{h^3}{3!} f^{(iv)}_i + \frac{h^4}{4!} f^{(v)}_i + \frac{h^5}{5!} f^{(vi)}_i + O(h^6) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

şeklinde yazılabilir. Daha sade haliyle bu denklemler

$$\begin{aligned} & (a_{-1} + a_0 + a_1) f_i + [h(a_1 - a_{-1}) + b_{-1} + b_0 + b_1] f'_i + \left[\frac{1}{2} h^2 (a_1 + a_{-1}) + h(b_1 - b_{-1}) \right] f''_i \\ & + \left[\frac{1}{6} h^3 (a_1 - a_{-1}) + \frac{1}{2} h^2 (b_1 + b_{-1}) \right] f'''_i + \left[\frac{1}{24} h^4 (a_1 + a_{-1}) + \frac{1}{6} h^3 (b_1 - b_{-1}) \right] f^{(iv)}_i \\ & + \left[\frac{1}{120} h^5 (a_1 - a_{-1}) + \frac{1}{24} h^4 (b_1 + b_{-1}) \right] f^{(v)}_i + \left[\frac{1}{720} h^6 (a_1 + a_{-1}) + \frac{1}{120} h^5 (b_1 - b_{-1}) \right] f^{(vi)}_i = 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

eşitliği şeklinde ifade edilebilir. (3.4) denkleminin tam olarak sağlanması için bütün katsayıların sıfır olması gerekir. Eşitliğin sağlanabilmesi için sol taraftaki ifadelerin önündeki katsayıların sıfır olması gerekir. Oluşturulacak sayısal yöntemin kaçınıcı basamaktan türev için bir yaklaşım olacağına bağlı olarak bu katsayılar sıfıra eşitlenir ve elde edilen denklem sistemi çözülerek $a_i, b_i, i = -1, 0, 1$ katsayıları bulunur. Örneğin, üçüncü mertebeden bir şema elde etmek için, f_i, f'_i, f''_i, f'''_i terimlerinin katsayıları sıfıra eşitlenirse

$$(a_{-1} + a_0 + a_1) = 0 \quad (3.5)$$

$$h(a_1 - a_{-1}) + b_{-1} + b_0 + b_1 = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{2}h^2(a_1 + a_{-1}) + h(b_1 - b_{-1}) = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{6}h^3(a_1 - a_{-1}) + \frac{1}{2}h^2(b_1 + b_{-1}) = 0 \quad (3.8)$$

sistemi elde edilir. Dört denklem ve altı bilinmeyen içeren bu sistemde iki parametre b_1 ve b_{-1} serbest parametreler olarak seçilirse

$$a_1 = \frac{1}{2h}(-5b_1 - b_{-1}) \quad (3.9)$$

$$a_0 = \frac{2}{h}(b_1 - b_{-1}) \quad (3.10)$$

$$a_{-1} = \frac{1}{2h}(b_1 + 5b_{-1}) \quad (3.11)$$

$$b_0 = 2(b_1 + b_{-1}) \quad (3.12)$$

elde edilir. Bu parametreler (3.2) denkleminde yerine yazılırsa

$$\frac{a_{-1}}{b_1}f_{i-1} + \frac{a_0}{b_1}f_i + \frac{a_1}{b_1}f_{i+1} + \frac{b_{-1}}{b_1}f'_{i-1} + \frac{b_0}{b_1}f'_i + f'_{i+1} = 0 \quad (3.13)$$

eşitliğine ulaşılır. Dolayısıyla $\alpha = \frac{b_{-1}}{b_1}$ olmak üzere (3.9-3.12) eşitliklerinden

$$\frac{a_1}{b_1} = \frac{1}{2h}(-5 - \alpha) \quad (3.14)$$

$$\frac{a_0}{b_1} = \frac{2}{h}(1 - \alpha) \quad (3.15)$$

$$\frac{a_{-1}}{b_1} = \frac{1}{2h}(1 + 5\alpha) \quad (3.16)$$

$$\frac{b_0}{b_1} = 2(1 + \alpha) \quad (3.17)$$

elde edilir. (3.14-3.17) eşitlikleri (3.13) denkleminde yerine yazılırsa

$$\alpha f'_{i-1} + 2(1 + \alpha)f'_i + f'_{i+1} = -\frac{1}{2h}(1 + 5\alpha)f_{i-1} - \frac{2}{h}(1 - \alpha)f_i + \frac{1}{2h}(5 + \alpha)f_{i+1} + TE \quad (3.18)$$

elde edilir. Burada

$$TE = \frac{1}{12}h^3(1 - \alpha)f_i^{iv} + \frac{1}{60}h^4(1 + \alpha)f_i^v + \frac{1}{180}h^5(1 - \alpha)f_i^{vi} + \dots \quad (3.19)$$

yerel kesme hatasıdır. Dikkat edilecek olursa, yerel kesme hatasında $\alpha = 1$ için, TE teriminin ilk bileşeni yok olur ve şema dördüncü mertebeden olur, buna karşılık α 'nın diğer değerleri için şema üçüncü mertebededir. Özel olarak $\alpha = 1$ için ilgili şema

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = -\frac{3}{h}(f_{i-1} - f_{i+1}) \quad (3.20)$$

şeklinde yazılabilir. (3.20) birinci basamaktan türev için dördüncü metrebeden bir yaklaşımdır. Birinci basamaktan türev için iki, üç ve daha fazla mertebeden yaklaşımlar benzer şekilde katsayıların uygun seçimleri ile bulunulabilir.

Birinci mertebeden türevin yaklaşık hesabı yukarıda açıklandığı üzere bulunabileceği gibi, Pade yaklaşımı yardımıyla da bulunabilir [46]. Birinci mertebeden türev yaklaşımı için

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h} \quad (3.21)$$

eşitliği ele alınsın. Burada a , b , c , α ve β katsayıları arasındaki ilişki, gerekli mertebeye kadar Taylor serisi katsayıları eşleştirilerek elde edilecek sabitlerdir. Denklem (3.21)'in sol tarafındaki terimlerin Taylor serisi açılımları

$$f'_{i-2} = f'_i - 2hf''_i + \frac{4}{2!}h^2f'''_i - \frac{8}{3!}h^3f^{(iv)}_i + \frac{16}{4!}h^4f^{(v)}_i \quad (3.22)$$

$$f'_{i-1} = f'_i - hf''_i + \frac{1}{2!}h^2f'''_i - \frac{1}{3!}h^3f^{(iv)}_i + \frac{1}{4!}h^4f^{(v)}_i \quad (3.23)$$

$$f'_{i+1} = f'_i + hf''_i + \frac{1}{2!}h^2f'''_i + \frac{1}{3!}h^3f^{(iv)}_i + \frac{1}{4!}h^4f^{(v)}_i \quad (3.24)$$

$$f'_{i+2} = f'_i + 2hf''_i + \frac{4}{2!}h^2f'''_i + \frac{8}{3!}h^3f^{(iv)}_i + \frac{16}{4!}h^4f^{(v)}_i \quad (3.25)$$

şeklindedir. Denklem (3.21)'in sol tarafını aşağıdaki şekilde yeniden yazılırsa:

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = \beta(f'_{i-2} + f'_{i+2}) + \alpha(f'_{i-1} + f'_{i+1}) + f'_i \quad (3.26)$$

elde edilir. (3.22-3.25) ifadeleri (3.21) denkleminin sol tarafında yerine konulduğunda

$$\begin{aligned} & \beta \left[2f'_i + 4h^2f'''_i + \frac{32h^4}{4!}f^{(v)}_i \right] + \alpha \left[2f'_i + h^2f'''_i + \frac{2h^4}{4!}f^{(v)}_i \right] + f'_i \\ & = (2\alpha + 2\beta + 1)f'_i + h^2(\alpha + 4\beta)f'''_i + \frac{2h^4}{4!}(\alpha + 16\beta)f^{(v)}_i \end{aligned} \quad (3.27)$$

elde edilir. Şimdi (3.21) denkleminin sağ tarafındaki terimlerin Taylor serisi açılımları

göz önüne alınırsa

$$f_{i-3} = f_i - 3hf'_i + \frac{9}{2!}h^2f''_i - \frac{27}{3!}h^3f'''_i + \frac{81}{4!}h^4f^{(iv)}_i - \frac{243}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.28)$$

$$f_{i-2} = f_i - 2hf'_i + \frac{4}{2!}h^2f''_i - \frac{8}{3!}h^3f'''_i + \frac{16}{4!}h^4f^{(iv)}_i - \frac{32}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.29)$$

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{1}{2!}h^2f''_i - \frac{1}{3!}h^3f'''_i + \frac{1}{4!}h^4f^{(iv)}_i - \frac{1}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.30)$$

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{1}{2!}h^2f''_i + \frac{1}{3!}h^3f'''_i + \frac{1}{4!}h^4f^{(iv)}_i + \frac{1}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.31)$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf'_i + \frac{4}{2!}h^2f''_i + \frac{8}{3!}h^3f'''_i + \frac{16}{4!}h^4f^{(iv)}_i + \frac{32}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.32)$$

$$f_{i+3} = f_i + 3hf'_i + \frac{9}{2!}h^2f''_i + \frac{27}{3!}h^3f'''_i + \frac{81}{4!}h^4f^{(iv)}_i + \frac{243}{4!}h^5f^{(v)}_i \quad (3.33)$$

elde edilir. (3.28-3.33) ifadeleri, (3.21) denkleminin sağ tarafına yerine konulursa

$$\begin{aligned} & \frac{a}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1}) + \frac{b}{4h}(f_{i+2} - f_{i-2}) + \frac{c}{6h}(f_{i+3} - f_{i-3}) \\ &= \frac{a}{2h} \left[2hf'_i + 2\frac{h^3}{3!}f'''_i + 2\frac{h^5}{5!}f^{(v)}_i \right] + \frac{b}{4h} \left[4hf'_i + 2\frac{8h^3}{3!}f'''_i + 2\frac{32h^5}{5!}f^{(v)}_i \right] \\ &+ \frac{c}{6h} \left[6hf'_i + 2\frac{27h^3}{3!}f'''_i + 2\frac{243h^5}{5!}f^{(v)}_i \right] \\ &= (a + b + c)f'_i + \frac{h^2}{3!}(a + 4b + 9c)f'''_i + \frac{h^4}{5!}(a + 16b + 81c)f^{(v)}_i \end{aligned} \quad (3.34)$$

eşitliği elde edilir. (3.27) ve (3.34) ifadelerinin birleştirilmesiyle

$$\begin{aligned} & (2\alpha + 2\beta + 1)f'_i + h^2(\alpha + 4\beta)f'''_i + \frac{2h^4}{4!}(\alpha + 16\beta)f^{(v)}_i \\ &= (a + b + c)f'_i + \frac{h^2}{3!}(a + 4b + 9c)f'''_i + \frac{h^4}{5!}(a + 16b + 81c)f^{(v)}_i \end{aligned} \quad (3.35)$$

eşitliği bulunur. Yerel kesme hatası dikkate alındığında birinci türev için yüksek mertebeden yaklaşım veren katsayılar şu şekildedir [46]:

$$1 + 2\alpha + 2\beta = a + b + c \quad \text{ikinci mertebe} \quad (3.36)$$

$$2\frac{3!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) = a + 2^2b + 3^2c \quad \text{dördüncü mertebe} \quad (3.37)$$

$$2\frac{5!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) = a + 2^4b + 3^4c \quad \text{altıncı mertebe} \quad (3.38)$$

$$2\frac{7!}{6!}(\alpha + 2^6\beta) = a + 2^6b + 3^6c \quad \text{sekizinci mertebe} \quad (3.39)$$

$$2\frac{9!}{8!}(\alpha + 2^8\beta) = a + 2^8b + 3^8c \quad \text{onuncu mertebe} \quad (3.40)$$

β ve α seçimine bağlı olarak üç köşegen veya beş köşegen şemalar oluşturulur. Eğer $\beta=0$ ise çeşitli üç köşegen şemalar üretilir. $\beta \neq 0$ için beş köşegen şemalar elde edilir. Parametrelerin seçimlerine bağlı olarak başka yaklaşımlar bulmak da mümkündür. Örneğin, dördüncü dereceden şema için (3.36) ve (3.37) bağıntıları kullanılır ve kesme hatası aşağıdaki

$$TE = [a + 2^4b + 3^4c - 2\frac{5!}{4!}(\alpha + 2^4\beta)]h^4f_i^v \quad (3.41)$$

şeklinde olur. Bilinmeyen sayısı beş ve denklem sayısı iki olduğundan bilinmeyenlerden üçü serbestçe seçilebilir. Özel olarak $\beta = 0$, $c = 0$ ve $a = \frac{2}{3}(\alpha + 2)$, $b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1)$ olmak üzere kesme hatası:

$$TE = 4(3\alpha - 1)h^4f_i^v \quad (3.42)$$

şeklindedir. $\alpha = \frac{1}{4}$ için dördüncü dereceden üç köşegenli sistem

$$\frac{1}{4}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{4}f'_{i+1} = \frac{3}{2} \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad (3.43)$$

elde edilir. $\alpha = \frac{1}{3}$ seçilirse altıncı dereceden şema

$$\frac{1}{3}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{3}f'_{i+1} = \frac{14}{9} \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \frac{1}{9} \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} \quad (3.44)$$

eşitliği ile verilebilir [47, 48, 49].

3.2 İkinci Basamaktan Türev için Kompakt Sonlu Fark Tasarısı

İkinci dereceden türev için (3.21)'dekine benzer bir yaklaşım kullanılabilir [46]. α, β, a, b ve c reel sabitler olmak üzere, ikinci basamaktan türev için

$$\begin{aligned} & \beta f''_{i-2} + \alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} + \beta f''_{i+2} \\ &= a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4h^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9h^2} \end{aligned} \quad (3.45)$$

eşitliği ele alınsın. Her bir terimin x_i etrafında Taylor serileri açılarak, birinci basamaktan türev yaklaşımı için izlenen yöntem takip edilirse, katsayılar arasındaki

ilişkiler

$$1 + 2\alpha + 2\beta = a + b + c \quad \text{ikinci mertebe} \quad (3.46)$$

$$\frac{4!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) = a + 2^2b + 3^2c \quad \text{dördüncü mertebe} \quad (3.47)$$

$$\frac{6!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) = a + 2^4b + 3^4c \quad \text{altıncı mertebe} \quad (3.48)$$

$$\frac{8!}{6!}(\alpha + 2^6\beta) = a + 2^6b + 3^6c \quad \text{sekizinci mertebe} \quad (3.49)$$

$$\frac{10!}{8!}(\alpha + 2^8\beta) = a + 2^8b + 3^8c \quad \text{onuncu mertebe} \quad (3.50)$$

eşitlikleri ile verilebilir [46]. Bu eşitliklerden bir parametrelili, iki parametrelili veya üç parametrelili yüksek basamaklardan türev yaklaşımları oluşturulabilir. Örneğin $\beta = c = 0$ için bir parametrelili çözüm $a = \frac{4}{3}(1 - \alpha)$, $b = \frac{1}{3}(-1 + 10\alpha)$ şeklindedir. Burada $\alpha = \frac{1}{10}$ alındığında

$$\frac{1}{10}f''_{i-1} + f''_i + \frac{1}{10}f''_{i+1} = \frac{6}{5} \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

bir başka deyişle

$$\frac{1}{12}(f''_{i-1} + 10f''_i + f''_{i+1}) = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \quad (3.51)$$

dördüncü mertebe kompakt yöntem elde edilir [51]. A ve B matrisleri sırasıyla

$$A = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 10 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 10 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 10 \end{pmatrix}, B = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$N \times N$ karesel matrisler olmak üzere (3.51) ayrışımı

$$\mathcal{A}_h = A^{-1}B \quad (3.52)$$

olmak üzere

$$f''_i = \mathcal{A}_h f_i \quad (3.53)$$

ile gösterilebilir.

Bölüm 4

KLEIN GORDON SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN SAYISAL ÇÖZÜMLERİ

Bu bölümde, Klein Gordon Schrödinger (KGS) denklemi için yapı koruyan yeni sayısal yöntemler verilecektir. İlk olarak sonsuz boyutlu KGS denkleminde uzay değişkenleri dördüncü mertebeden kompakt yöntemle ile ayrıklaştırılacak ve KGS denklemi sonlu boyutlu Hamilton denklem sistemi şekline getirecektir. Ardından, Hamilton sistemde zaman değişkeni için Hamilton (enerji) koruyan Ortalama Vektör Alanı (OVA), Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı (BOVA) ve buna bağlı Ek Yöntem, Bileşke yöntemi ve Toplam yöntemleri uygulanacaktır. Böylece KGS denkleminin sayısal çözümü için literatürde daha önce çalışılmamış beş yeni yöntem literatüre kazandırılmış olacaktır. Bu yeni yöntemlere ek olarak yine KGS denkleminin sayısal çözümü için denklemin kütle ve enerjisini koruyan yeni bir sonlu fark tasarısı literatüre kazandırılacaktır.

Klein Gordon Schrödinger (KGS) denklem sistemi (4.1), Schrödinger tipi bir dalga ile Klein Gordon tipi skaler bir alan arasındaki etkileşimi tanımlayan birleşik bir matematiksel modeldir. Bu sistem, relativistik kuantum alan teorisi ile parçacık–alan etkileşimlerinin modellenmesinde önemli bir yere sahiptir.

Klein Gordon Schrödinger denklemi

$$\begin{aligned} i\psi_t + \frac{1}{2}\psi_{xx} + \psi\phi &= 0, & x \in \Omega, 0 < t \leq T \\ \phi_{tt} - \phi_{xx} + \phi - |\psi|^2 &= 0, & x \in \Omega, 0 < t \leq T \end{aligned} \tag{4.1}$$

eşitlikleri ile tanımlı bir kısmi türevli denklem sistemidir. Burada $\Omega = (a, b) \subset \mathbb{R}$ olarak ele alınacaktır. (4.1) denklemi için

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad \phi_t(x, 0) = \phi_1(x), \quad a \leq x \leq b, \quad (4.2)$$

başlangıç koşulları

$$\psi(a, t) = \psi(b, t), \quad \phi(a, t) = \phi(b, t), \quad 0 < t \leq T \quad (4.3)$$

periyodik sınır koşulları olmak üzere başlangıç-sınır değer problemi (4.1)-(4.3)

$$M(t) = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx = M(0) \quad (4.4)$$

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_a^b [\phi(x, t)^2 + \phi_t^2(x, t) + \phi_x^2(x, t) + |\psi_x(x, t)|^2 - 2\phi(x, t)|\psi(x, t)|^2] dx = E(0) \quad (4.5)$$

korunum yasalarına sahip olduğu gösterilebilir [57].

(4.1) denkleminde; $\psi(x, t)$ kompleks değerli dalga fonksiyonunu, $\phi(x, t)$ ise gerçekteğerli skaler alanı temsil etmektedir. Schrödinger denklemindeki $\frac{1}{2}\psi_{xx}$ terimi dalganın dispersiyonunu ifade ederken, $\psi\phi$ terimi dalga fonksiyonu ile skaler alan arasındaki etkileşimi modellemektedir. Klein Gordon denklemindeki ϕ_{tt} terimi alanın zamana göre ikinci mertebeden değişimini, ϕ_{xx} terimi uzaysal yayılımı, ϕ terimi alanın kütle katkısını, $|\psi|^2$ terimi ise Schrödinger alanından kaynaklanan yoğunluğun skaler alan üzerindeki etkisini ifade etmektedir. Standart (4.1) KGS denklemi korunumlu karmaşık nükleon alanı ψ ile nötr reel skaler mezon alanı ϕ arasındaki etkileşimin dinamiğini tanımlayan klasik modeli temsil eder [59].

4.1 Sonsuz ve Sonlu Boyutlu Klein Gordon Schrödinger Denklemi

Bu bölümde (4.1) KGS denklemi ilk olarak sonsuz boyutlu Hamilton (2.49) şeklinde ifade edilecek ardından uzay değişkenleri Bölüm 3'te açıklandığı üzere kompakt bir tasarım ile ayrıklaştırılarak sonlu boyutlu bir Hamilton sistem şeklinde yazılacaktır.

Bu yazılımın ardında KGS denkleminin sayısal çözümü için OVA ve BOVA yöntemleri uygulanabilir hale gelmiş olur.

İlk olarak (4.1)-(4.3) başlangıç-sınır değer problemi ele alınsın. $\psi(x, t) = p(x, t) + iq(x, t)$, $\phi_t(x, t) = 2v(x, t)$, olmak üzere (4.1) denklemi

$$\begin{aligned} q_t &= \frac{1}{2}p_{xx} + p\phi \\ v_t &= \frac{1}{2}\phi_{xx} - \frac{1}{2}\phi + \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \\ p_t &= -\frac{1}{2}q_{xx} - q\phi \\ \phi_t &= 2v \end{aligned} \quad (4.6)$$

şeklinde yazılabilir. Bu sistem $z = [q, v, p, \phi]^T$

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} q \\ v \\ p \\ \phi \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

ve Hamilton fonksiyonu

$$\mathcal{H}(z, z_x) = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2}\phi(p^2 + q^2) - \frac{1}{4}(\phi^2 + \phi_x^2 + p_x^2 + q_x^2) - v^2 \right] dx$$

olmak üzere sonsuz boyutlu Hamilton denklem (2.49) formunda yazılabilir. Denklemi sonlu boyutlu bir Hamilton sistem şeklinde yazabilmek için uzay değişkenleri ayrıklaştırılır ve elde edilen sistemin sonlu boyutlu Hamilton (2.36) şeklinde yazılıp yazılamayacağına bakılır. Bu tez çalışmasında uzay değişkenleri kompakt sonlu fark tasarısı yardımıyla ayrıklaştırılacaktır.

N, M pozitif tam sayılar, zaman adım boyutu $\tau = \frac{T}{M}$, $h = \frac{b-a}{N}$ olmak üzere zaman-uzay bölgesi $[a, b] \times [0, T]$ eşit uzunluklu hücrelere bölünmüş olsun. $x_j = a + hj, j = 1, \dots, N+1$, $t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, M$ olmak üzere $u(x, t)$ fonksiyonunun (x_j, t_n) grid noktasındaki yaklaşık değeri u_j^n ile gösterilsin. Zamana göre ortalama ve fark operatörleri sırasıyla

$$u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2}, \quad \delta_t u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau}$$

ile tanımlansın. Ayrıca

$$\langle u^n, v^n \rangle = h \sum_{j=0}^N u_j^n \overline{v_j^n}, \quad \|u^n\|^2 = h \sum_{j=0}^N |u_j^n|^2, \quad \|u^n\|_{\infty} = \max_{0 \leq j \leq N} |u_j^n|.$$

kompleks iç çarpım ve ilgili normlar tanımları olsunlar.

(4.1) KGS denkleminde uzay değişkeni dördüncü basamaktan kompakt yöntem (3.53) ile ayrıklaştırılırsa

$$\begin{aligned}
\frac{dQ}{dt} - \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}P - \Phi \cdot P &= 0 \\
\frac{dV}{dt} - \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}\Phi + \frac{1}{2}\Phi - \frac{1}{2}[P.^2 + Q.^2] &= 0 \\
\frac{dP}{dt} + \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}Q + \Phi \cdot Q &= 0 \\
\frac{d\Phi}{dt} - 2V &= 0
\end{aligned} \tag{4.8}$$

yarı ayırık adi türevli diferansiyel denklem sistemi elde edilir. Burada $P = (p_1, p_2, \dots, p_N)^T$, $Q = (q_1, q_2, \dots, q_N)^T$, $\Phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)^T$, $V = (v_1, v_2, \dots, v_N)^T$, $\Phi \cdot Q = [\phi_1 p_1, \phi_2 p_2, \dots, \phi_N p_N]^T$, $P.^2 = [p_1^2, p_2^2, \dots, p_N^2]^T$ ve $Q.^2 = [q_1^2, q_2^2, \dots, q_N^2]^T$ olarak tanımlanmıştır. Yarı ayırık sistem (4.8)

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} Q \\ V \\ P \\ \Phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}Q + \Phi \cdot Q \\ -2V \\ \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}P + \Phi \cdot P \\ \frac{1}{2}\mathcal{A}_h^{-1}\Phi - \frac{1}{2}\Phi + \frac{1}{2}(P.^2 + Q.^2) \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

ve

$$\begin{aligned}
H(Q, V, P, \Phi) = \frac{1}{4}(P^T \mathcal{A}_h^{-1}P + Q^T \mathcal{A}_h^{-1}Q &+ \Phi^T(\mathcal{A}_h^{-1} + I)\Phi) - V^T V \\
&+ \frac{1}{2}\Phi^T(P.^2 + Q.^2)
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Hamilton fonksiyonu olmak üzere sonlu boyutlu Hamilton sistem (2.36) şeklinde yazılabilir. Burada $\mathbf{0}$ ve $\mathbf{I}$ sırasıyla $N \times N$ sıfır ve birim matrisleri temsil ederler.

Bundan sonra (4.9) sonlu boyutlu Hamilton sistem için (4.10) Hamilton korunumlu OVA (2.26), BOVA (2.32) ve BOVA yöntemi ile ilişkili (2.33) Ek yöntem, (2.34) Bileşke yöntem ve (2.35) Toplam yöntemleri uygulanabilir.

4.2 Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Ortalama Vektör Alanı Yöntemi

Sonlu boyutlu Hamilton sistemi (4.9) enerji koruyan OVA yöntemi (2.26) ile ayrıklaştırılırsa

$$\begin{aligned}
\delta_t Q^n + \frac{1}{2} \mathcal{A}_h^{-1} P^{n+1/2} + \frac{1}{6} (\Phi^{n+1} \cdot P^{n+1} + 4\Phi^{n+1/2} \cdot P^{n+1/2} + \Phi^n \cdot P^n) &= 0 \\
\delta_t V^n - \frac{1}{2} (\mathcal{A}_h^{-1} + I) \Phi^{n+1/2} - \frac{1}{6} ((P^{n+1})^2 + 4(P^{n+1/2})^2 + (P^n)^2 \\
&\quad + (Q^{n+1})^2 + 4(Q^{n+1/2})^2 + (Q^n)^2) &= 0 \\
\delta_t P^n - \frac{1}{2} \mathcal{A}_h^{-1} Q^{n+1/2} - \frac{1}{6} (\Phi^{n+1} \cdot Q^{n+1} + 4\Phi^{n+1/2} \cdot Q^{n+1/2} + \Phi^n \cdot Q^n) &= 0 \\
\delta_t \Phi^n - V^n - V^{n+1} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

elde edilir. Bölüm (2.3.1)'de açıklandığı üzere, (4.11) kompakt OVA yöntemi, (4.10) Hamilton fonksiyonunun ayrık halini tam olarak korur; yani

$$H(Q^{n+1}, V^{n+1}, P^{n+1}, \Phi^{n+1}) = H(Q^n, V^n, P^n, \Phi^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, N.$$

eşitliği sağlanır. Görüleceği üzere (4.11) yöntemi kapalı bir yöntemdir ve iteratif bir yöntem kullanılarak çözülebilir. Bu tez çalışmasında burada olduğu gibi tüm kapalı yöntemler için Newton-Raphson yöntemi kullanılmıştır. Q^0, V^0, P^0, Φ^0 başlangıç koşullarını kullanarak Q^1, V^1, P^1, Φ^1 'in çözümü Newton-Raphson yöntemi ile elde edilir.

4.3 Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Yöntemi

Bu bölümde sonlu boyutlu Hamilton sistemi (4.9) enerji koruyan BOVA yöntemi (2.32) ile ayrıklaştırılacaktır. (4.9) Hamilton sistemine (2.32) BOVA yöntemi uygulanırsa

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau} (Q^{n+1} - Q^n) + \frac{1}{4} \mathcal{A}_h^{-1} (P^{n+1} + P^n) + \frac{1}{2} \Phi^n \cdot (P^{n+1} + P^n) &= 0 \\
\frac{1}{\tau} (V^{n+1} - V^n) - \frac{1}{4} (\mathcal{A}_h^{-1} + I) (\Phi^{n+1} + \Phi^n) - \frac{1}{2} [(P^{n+1})^2 + (Q^{n+1})^2] &= 0 \\
\frac{1}{\tau} (P^{n+1} - P^n) - \frac{1}{4} \mathcal{A}_h^{-1} (Q^{n+1} + Q^n) - \frac{1}{2} \Phi^n \cdot (Q^{n+1} + Q^n) &= 0 \\
\frac{1}{\tau} (\Phi^{n+1} - \Phi^n) - \frac{V^{n+1} + V^n}{2} &= 0
\end{aligned} \tag{4.12}$$

elde edilir. Bölüm (2.3.2)' de açıklandığı üzere, (4.12) yöntemi , (4.10) ile tanımlı Hamilton fonksiyonunun ayrık halini tam olarak korur. Bir başka deyişle

$$H(Q^{n+1}, V^{n+1}, P^{n+1}, \Phi^{n+1}) = H(Q^n, V^n, P^n, \Phi^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, M.$$

eşitliği sağlanır.

Kompakt BOVA yöntemi (4.12) ile elde edilen denklem sistemi, kompakt OVA yöntemi (4.11) ile elde edilen sistemin aksine lineerdir. Bir başka deyişle (4.12) sistemini çözmek için Newton-Raphson gibi iteratif yöntemlere gerek yoktur. P^n , Q^n , V^n , Φ^n biliniyorsa (4.12) sistemindeki birinci ve üçüncü denklemden P^{n+1} ve Q^{n+1} bulunur. Daha sonra P^{n+1} ve Q^{n+1} ikinci ve dördüncü denklemde yerine yazılarak V^{n+1} ve Φ^{n+1} hesaplanır. Matris formda

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} + \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^n & \frac{1}{\tau}I \\ \frac{1}{\tau}I & -\frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} - \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^{n+1} \\ Q^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} - \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^n & \frac{1}{\tau}I \\ \frac{1}{\tau}I & \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} + \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^n \\ Q^n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\tau}I & -\frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I) \\ -\frac{1}{2}I & \frac{1}{\tau}I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V^{n+1} \\ \Phi^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau}I & \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I) \\ \frac{1}{2}I & \frac{1}{\tau}I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V^n \\ \Phi^n \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (P^{n+1})^2 + (Q^{n+1})^2 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

eşitlikleriyle gösterilebilir. Burada I , $N \times N$ birim matrisi, $\mathbf{0}$ ise $N \times 1$ sıfır sütun vektörünü göstermektedir.

Teorem 4. *Kompakt bölünmüş ortalama vektör alanı yöntemi (4.12),*

$$M(Q^n, P^n) = \|Q^n\|^2 + \|P^n\|^2 \quad (4.13)$$

ayrık kütle olmak üzere (4.9) sisteminin kütlelerini ayrık düzeyde korur. Bir başka deyişle

$$M(Q^{n+1}, P^{n+1}) = M(Q^n, P^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, M. \quad (4.14)$$

eşitliği sağlanır.

İspat: (4.12) sisteminde birinci denklemin $Q^{n+1} + Q^n$ ile, üçüncü denklemin ise $P^{n+1} + P^n$ ile iç çarpımı alınsın. Bu durumda

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(Q^{n+1} - Q^n) \cdot (Q^{n+1} + Q^n) + \frac{1}{4}\mathcal{K}(P^{n+1} + P^n) \cdot (Q^{n+1} + Q^n) \\ + \frac{1}{2}\Phi^n \cdot (P^{n+1} + P^n) \cdot (Q^{n+1} + Q^n) = 0 \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(P^{n+1} - P^n) \cdot (P^{n+1} + P^n) - \frac{1}{4}\mathcal{K}(Q^{n+1} + Q^n) \cdot (P^{n+1} + P^n) \\ - \frac{1}{2}\Phi^n \cdot (Q^{n+1} + Q^n) \cdot (P^{n+1} + P^n) = 0. \end{aligned}$$

elde edilir. Bu iki denklem toplandığında

$$\frac{1}{\tau} (\|P^{n+1}\|^2 + \|Q^{n+1}\|^2 - \|P^n\|^2 - \|Q^n\|^2) = 0$$

olur. Buradan (4.14) ayrık kütlenin korunduğu sonucu çıkar.

4.4 Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Ek-BOVA Yöntem

Bu bölümde sonlu boyutlu Hamilton sistemi (4.9) enerji koruyan BOVA ile ilişkili Ek yöntem (2.33) kullanılarak ayrıklaştırılacaktır. (4.9) Hamilton sistemine (2.32) Ek yöntemi uygulanırsa

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}(Q^{n+1} - Q^n) + \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(P^{n+1} + P^n) + \frac{1}{2}\Phi^{n+1} \cdot (P^{n+1} + P^n) &= 0 \\ \frac{1}{\tau}(V^{n+1} - V^n) - \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I)(\Phi^{n+1} + \Phi^n) - \frac{1}{2}[(P^n)^2 + (Q^n)^2] &= 0 \\ \frac{1}{\tau}(P^{n+1} - P^n) - \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(Q^{n+1} + Q^n) - \frac{1}{2}\Phi^{n+1} \cdot (Q^{n+1} + Q^n) &= 0 \\ \frac{1}{\tau}(\Phi^{n+1} - \Phi^n) - \frac{V^{n+1} + V^n}{2} &= 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

elde edilir. Dikkat edilecek olursa (4.15) şeması tıpkı (4.12) şeması gibi lineer kapalı bir yöntemdir. (4.15) denklem sisteminde P^n , Q^n , V^n , Φ^n biliniyorsa (4.15) şemasının ikinci ve dördüncü denkleminde V^{n+1} ve Φ^{n+1} elde edilir. Daha sonra V^{n+1} ve Φ^{n+1} , (4.15) şemasının birinci ve üçüncü denkleminde yerine konularak P^{n+1} ve Q^{n+1} hesaplanır. Yapılan bu işlemler matris formda

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau}I & -\frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I) \\ -\frac{1}{2}I & \frac{1}{\tau}I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V^{n+1} \\ \Phi^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\tau}I & \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I) \\ \frac{1}{2}I & \frac{1}{\tau}I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V^n \\ \Phi^n \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (P^n)^2 + (Q^n)^2 \\ \mathbf{0}_{N \times 1} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} + \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^{n+1} & \frac{1}{\tau}I_N \\ \frac{1}{\tau}I_N & -\frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} - \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^{n+1} \\ Q^{n+1} \end{bmatrix} &= \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} - \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^{n+1} & \frac{1}{\tau}I \\ \frac{1}{\tau}I & \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1} + \frac{1}{2}\text{diag}\Phi^{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^n \\ Q^n \end{bmatrix}$$

şekilde gösterilebilir. (4.15) Ek-BOVA yöntemi de (4.14) ayrık kütleli tam olarak korur.

4.5 Klein Gordon Schrödinger Denklemleri İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Bileşke Yöntemi

Bu bölümde sonlu boyutlu Hamilton sistemi (4.9) için (4.12) BOVA ve (4.15) Ek yöntem kullanılarak (2.34) bileşke yöntemi tanımlanacaktır. Bu kapsamda (4.9) Hamilton sistemi için BOVA-B bileşke yöntemi

$$\begin{aligned} \frac{2}{\tau}(Q^* - Q^n) + \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(P^* + P^n) + \frac{1}{2}\Phi^* \cdot (P^* + P^n) &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(V^* - V^n) - \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I)(\Phi^* + \Phi^n) - \frac{1}{2}[(P^n)^2 + (Q^n)^2] &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(P^* - P^n) - \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(Q^* + Q^n) - \frac{1}{2}\Phi^* \cdot (Q^* + Q^n) &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(\Phi^* - \Phi^n) - \frac{V^* + V^n}{2} &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(Q^{n+1} - Q^*) + \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(P^{n+1} + P^*) + \frac{1}{2}\Phi^* \cdot (P^{n+1} + P^*) &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(V^{n+1} - V^*) - \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I)(\Phi^{n+1} + \Phi^*) - \frac{1}{2}[(P^{n+1})^2 + (Q^{n+1})^2] &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(P^{n+1} - P^*) - \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(Q^{n+1} + Q^*) - \frac{1}{2}\Phi^* \cdot (Q^{n+1} + Q^*) &= 0 \\ \frac{2}{\tau}(\Phi^{n+1} - \Phi^*) - \frac{V^{n+1} + V^*}{2} &= 0 \end{aligned} \tag{4.16}$$

şeklinde dir. İlk dört denklemde Ek-BOVA yöntemidir. İlk dört denklemden P^0, Q^0, V^0, Φ^0 başlangıç koşulları yardımıyla P^*, Q^*, V^*, Φ^* bulunur. Elde edilen P^*, Q^*, V^*, Φ^* son dört denklem için başlangıç koşulu olarak kullanılır ve P^1, Q^1, V^1, Φ^1 bulunur. İterasyona bu şekilde devam edilerek her $n = 0, 1, 2, \dots, M$ için P^n, Q^n, V^n, Φ^n ayrık çözümler bulunmuş olur.

BOVA (4.12) ve Ek yöntem (4.15) hem ayrık Hamiltonu hem de ayrık kütleli

koruduklarından, BOVA-B bileşke yöntemi de (4.16) hem Hamiltonu hem de kütleyi korur.

4.6 Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kompakt Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı Toplam Yöntemi

Son olarak (4.1) KGS denkleminde BOVA-T yöntemi (2.35) uygulanırsa

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau}(Q^{n+1} - Q^n) + \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(P^{n+1} + P^n) + \frac{1}{4}(\Phi^{n+1} + \Phi^n) \cdot (P^{n+1} + P^n) &= 0 \\
\frac{1}{\tau}(V^{n+1} - V^n) - \frac{1}{4}(\mathcal{A}_h^{-1} + I)(\Phi^{n+1} + \Phi^n) - \frac{1}{4}[(P^n)^2 + (Q^n)] & \\
&\quad - \frac{1}{4}[(P^{n+1})^2 + (Q^{n+1})] = 0 \quad (4.17) \\
\frac{1}{\tau}(P^{n+1} - P^n) - \frac{1}{4}\mathcal{A}_h^{-1}(Q^{n+1} + Q^n) - \frac{1}{4}(\Phi^{n+1} + \Phi^n) \cdot (Q^{n+1} + Q^n) &= 0 \\
\frac{1}{\tau}(\Phi^{n+1} - \Phi^n) - \frac{1}{2}(V^{n+1} + V^n) &= 0
\end{aligned}$$

denklem sistemi elde edilir. Görüleceği üzere bu denklem sistemi lineer olmayan bir denklem sistemidir. Bu tez çalışmasında lineer olmayan diğer tüm sistemlerde olduğu gibi bu sistemde de Newton-Raphson metodu kullanılmıştır.

4.7 Klein Gordon Schrödinger Denklemi İçin Kütle ve Enerji Koruyan Sonlu Fark Tasarısı

Bu bölümde (4.1)-(4.3) başlangıç-sınır değer probleminin sayısal çözümü için (4.4) Kütle $M(t)$ ve (4.5) Enerji $E(t)$ koruyan yeni bir sonlu farklar tasarısı önerilecektir. (4.1) KGS denklemini

$$i\psi_t + \frac{1}{2}\psi_{xx} + \psi\phi = 0 \quad (4.18)$$

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} + \phi - |\psi|^2 = 0 \quad (4.19)$$

ele alalım. Bu bölümde kullanılacak sonlu fark tasarıları için aşağıdaki operatörleri tanımlayalım. w, v kompleks değerli bir fonksiyon olmak üzere

$$\begin{aligned} (w_j^n)_x &= \frac{w_{j+1} - w_j}{h}, & (w_j^n)_{\bar{x}} &= \frac{w_j - w_{j-1}}{h}, & (w_j^n)_{\hat{x}} &= \frac{w_{j+1} - w_{j-1}}{2h} \\ (w_j^n)_t &= \frac{w_j^{n+1} - w_j^n}{\tau}, & w_j^{n+1/2} &= \frac{w_j^{n+1} + w_j^n}{2}, & \langle w, v \rangle &= h \sum_{j=1}^N w_j \bar{v}_j \\ (w_j)_{x\bar{x}} &= \frac{w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1}}{h^2}, & (w_j)_{\hat{x}\hat{x}} &= \frac{w_{j+2} - 2w_j + w_{j-2}}{4h^2} \end{aligned}$$

$\theta_1, \theta_2 \in \mathbb{R}$ ve $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 1$ olmak üzere (4.1)-(4.3) başlangıç-sınır değer probleminin sayısal çözümü için

$$i(\psi_j^n)_t + \frac{1}{2} \left[\frac{4}{3} (\psi_j^{n+1/2})_{x\bar{x}} - \frac{1}{3} (\psi_j^{n+1/2})_{\hat{x}\hat{x}} \right] + \psi_j^{n+1/2} \phi_j^{n+1/2} = 0, \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} (\phi_j^n)_{t\bar{t}} - (\phi_j^n)_{x\bar{x}} + (1 - \theta_1) \phi_j^n + (\theta_1 - \theta_2) \left(\frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^{n-1}}{2} \right) \\ + \theta_2 \left(\frac{\phi_j^{n+1} + 2\phi_j^n + \phi_j^{n-1}}{4} \right) - |\psi_j^n|^2 = 0, \end{aligned} \quad (4.21)$$

sonlu fark tasarısını önerilmektedir. Önerilen bu yöntemin ayırık kütle ve ayırık enerjiyi koruyup korumadığını araştırmak için aşağıdaki sonuçlar ele alınsın:

Lemma: $u(x, t)$ ve $v(x, t)$ komplek değerli iki fonksiyon olmak üzere, aşağıdaki eşitlikler sağlanır [50].

- 1) $\text{Re} \langle u_{x\bar{x}}, v \rangle = -\text{Re} \langle u_x, v_x \rangle = \text{Re} \langle u, v_{x\bar{x}} \rangle$
- 2) $\text{Re} \langle u_{\hat{x}\hat{x}}, v \rangle = -\text{Re} \langle u_{\hat{x}}, v_{\hat{x}} \rangle = \text{Re} \langle u, v_{\hat{x}\hat{x}} \rangle$
- 3) $\text{Re} \langle u_{x\bar{x}}, u \rangle = -\|u_x\|^2$
- 4) $\text{Re} \langle u_{\hat{x}\hat{x}}, u \rangle = -\|u_{\hat{x}}\|^2$
- 5) $\text{Im} \langle u_{x\bar{x}}, u \rangle = 0$
- 6) $\text{Im} \langle u_{\hat{x}\hat{x}}, u \rangle = 0$
- 7) $\text{Im} \langle u, u \rangle = 0$

Teorem 5. *Başlangıç-Sınır değer problemi (4.1)-(4.3) için (4.20)-(4.21) sonlu fark tasarısı ayırık kütle*

$$M(\psi^n) = \|\psi^n\|^2$$

ve ayrık enerji

$$\begin{aligned}
E(\psi^n, \phi^n) = & \frac{4}{3} \|(\psi_j^n)_x\|^2 - \frac{1}{3} \|(\psi_j^n)_{\hat{x}}\|^2 + \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2 \\
& - h \sum_{j=1}^N (\phi_j^{n-1})_x (\phi_j^n)_x + (1 - \theta_1) h \sum_{j=1}^N \phi_j^{n-1} \phi_j^n \\
& + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \left(\|\phi_j^n\|^2 + \|\phi_j^{n-1}\|^2 \right) + \theta_2 \|\phi_j^{n-\frac{1}{2}}\|^2 \\
& - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

olmak üzere

$$M(\psi^n) = M(\psi^{n-1}) = \dots = M(\psi^0), \quad n = 0, 1, \dots, M \tag{4.23}$$

ve

$$E(\psi^n, \phi^n) = M(\psi^{n-1}, \phi^{n-1}) = \dots = M(\psi^0, \phi^0), \quad n = 0, 1, \dots, M \tag{4.24}$$

anlamında ayrık kütleyi ve ayrık enerjiyi korur.

İspat: Kolaylık ve basitlik olması bakımında ayrık kütlelerin ispatlarında yukarıda verilen Lemma kullanılacaktır.

İlk olarak (4.20) denklemi $\frac{\psi_j^{n+1} + \psi_j^n}{2} = \psi_j^{n+1/2}$ ile iç çarpım yapıp sanal kısmını alınıp. İç çarpımı alınan eşitlikteki ilk terim

$$Im \left\{ i \langle (\psi_j^n)_t, \psi_j^{n+1/2} \rangle \right\} = Im \left\{ \frac{ih}{2\tau} \sum_{j=1}^N (\psi_j^{n+1} - \psi_j^n) (\overline{\psi_j^{n+1} + \psi_j^n}) \right\} \tag{4.25}$$

$$= Im \left\{ \frac{ih}{2\tau} \sum_{j=1}^N (|\psi_j^{n+1}|^2 - |\psi_j^n|^2) \right\} \tag{4.26}$$

$$= \frac{1}{2\tau} (\|\psi_j^{n+1}\|^2 - \|\psi_j^n\|^2) \tag{4.27}$$

elde edilir. Lemma 3 ve 4' ten yararlanılarak iç çarpımı alınan eşitlikteki ikinci ve üçüncü terimleri reel olduğu görülebilir. Bu durumda sanal kısım sıfır olur, bir başka deyişle sırasıyla

$$Im \langle (\psi_j^{n+1/2})_{x\bar{x}}, \psi_j^{n+1/2} \rangle = 0, \quad Im \langle \psi_j^{n+1/2})_{\hat{x}\hat{x}}, \psi_j^{n+1/2} \rangle = 0 \tag{4.28}$$

bulunur. İç çarpımı alınan eşitlikteki son terim yine reel olup

$$Im \langle \psi_j^{n+1/2} \phi_j^{n+1/2}, \psi_j^{n+1/2} \rangle = 0 \tag{4.29}$$

olduğu görülebilir. Tüm bu terimler toplanırsa,

$$\frac{1}{2\tau}(\|\psi_j^{n+1}\|^2 - \|\psi_j^n\|^2) = 0 \quad (4.30)$$

yani

$$\|\psi_j^{n+1}\|^2 = \|\psi_j^n\|^2$$

ayrık kütle (4.23) korunumu gösterilmiş olur.

Enerji korunumunu göstermek için (4.20) denkleminin $(\psi_j^n)_t$ ile iç çarpımının reel kısmı düşünölsün. Bu durumda iç çarpımı alınan ifadede birinci terim tam sanal olup reel kısmı

$$\text{Re} \langle i(\delta_t \psi_j^n), (\delta_t \psi_j^n) \rangle = \text{Re} \{ i \|\delta_t \psi_j^n\|^2 \} = 0 \quad (4.31)$$

bulunur. İç çarpımı alınan ifadenin ikinci teriminin reel kısmı, yine Lemma yardımıyla

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle \psi_{x\bar{x}}^{n+\frac{1}{2}}, \delta_t \psi_j^{n+\frac{1}{2}} \rangle &= \text{Re} \left\langle \left(\frac{\psi_j^{n+1} + \psi_j^n}{2} \right)_{x\bar{x}}, \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\tau} \left\{ \text{Re} \langle (\psi_j^{n+1})_{x\bar{x}}, \psi_j^{n+1} \rangle - \text{Re} \langle (\psi_j^n)_{x\bar{x}}, \psi_j^n \rangle \right. \\ &\quad \left. + \text{Re} \langle (\psi_j^n)_{x\bar{x}}, \psi_j^{n+1} \rangle - \text{Re} \langle (\psi_j^{n+1})_{x\bar{x}}, \psi_j^n \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2\tau} \left\{ -\text{Re} \langle (\psi_j^{n+1})_x, (\psi_j^{n+1})_x \rangle + \text{Re} \langle (\psi_j^n)_x, (\psi_j^n)_x \rangle \right. \\ &\quad \left. - \text{Re} \langle (\psi_j^n)_x, (\psi_j^{n+1})_x \rangle + \text{Re} \langle (\psi_j^{n+1})_x, (\psi_j^n)_x \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2\tau} (-\|(\psi_j^{n+1})_x\|^2 + \|(\psi_j^n)_x\|^2) \end{aligned} \quad (4.32)$$

elde edilir. Benzer şekilde, yine Lemma yardımıyla, üçüncü terim

$$\text{Re} \langle (\psi_j^{n+\frac{1}{2}})_{\hat{x}\hat{x}}, \delta_t \psi_j^{n+\frac{1}{2}} \rangle = \frac{1}{2\tau} (-\|(\psi_j^{n+1})_{\hat{x}}\|^2 + \|(\psi_j^n)_{\hat{x}}\|^2) \quad (4.33)$$

eşitliği şeklinde yazılabilir. İç çarpımı alınan ifadenin dördüncü teriminin reel kısmından ise

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle \psi_j^{n+\frac{1}{2}} \phi_j^{n+\frac{1}{2}}, \delta_t \psi_j^{n+\frac{1}{2}} \rangle &= h \sum_{j=1}^N \left(\frac{\psi_j^{n+1} + \psi_j^n}{2} \right) \phi_j^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\overline{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}}{\tau} \right) \\ &= \text{Re} \left\{ \frac{h}{2\tau} \sum_{j=1}^N (\psi_j^{n+1} + \psi_j^n) (\overline{\psi_j^{n+1} + \psi_j^n}) \phi_j^{n+\frac{1}{2}} \right\} \end{aligned}$$

$$= \frac{h}{2\tau} \sum_{j=1}^N (|\psi_j^{n+1}|^2 - |\psi_j^n|^2) \phi_j^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.34)$$

eşitliği elde edilir. Yukarıda bulunan tüm terimler toplandığında, (4.31), (4.32), (4.33) ve (4.34) eşitliklerinden

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \frac{1}{2\tau} (-\|(\psi_j^{n+1})_x\|^2 + \|(\psi_j^n)_x\|^2) - \frac{1}{6} \frac{1}{2\tau} (-\|(\psi_j^{n+1})_{\bar{x}}\|^2 + \|(\psi_j^n)_{\bar{x}}\|^2) \\ & + \frac{h}{2\tau} \sum_{j=1}^N (|\psi_j^{n+1}|^2 - |\psi_j^n|^2) \phi_j^{n+\frac{1}{2}} = 0 \end{aligned}$$

veya

$$\begin{aligned} & \frac{4}{3} (-\|(\psi_j^{n+1})_x\|^2 + \|(\psi_j^n)_x\|^2) - \frac{1}{3} (-\|(\psi_j^{n+1})_{\bar{x}}\|^2 + \|(\psi_j^n)_{\bar{x}}\|^2) \\ & - 2h \sum_{j=1}^N (|\psi_j^{n+1}|^2 - |\psi_j^n|^2) \phi_j^{n+\frac{1}{2}} = 0 \end{aligned} \quad (4.35)$$

sonucuna ulaşılır.

Önerilen yeni sonlu fark tasarısında ikinci denklem (4.21) göz önüne alınmadan önce

$$\begin{aligned} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} &= \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\tau} + \frac{\phi_j^n - \phi_j^{n-1}}{\tau} = (\phi_j^n)_t + (\phi_j^{n-1})_t \\ (\phi_j^n)_{t\bar{t}} &= \frac{\phi_j^{n+1} - 2\phi_j^n + \phi_j^{n-1}}{\tau^2} = \frac{1}{\tau} \left[\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\tau} - \frac{\phi_j^n - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right] \\ &= \frac{1}{\tau} \left[(\phi_j^n)_t - (\phi_j^{n-1})_t \right]. \end{aligned}$$

eşitliğini göz önüne alınsın. Şimdi (4.21) denkleminin $\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} = (\phi_j^n)_t + (\phi_j^{n-1})_t$ ile iç çarpım yapıp reel kısmına bakılsın. İç çarpımı alınan ifadede birinci terim

$$\begin{aligned} \langle (\phi_j^n)_{t\bar{t}}, (\phi_j^n)_t + (\phi_j^{n-1})_t \rangle &= \frac{1}{\tau} \langle (\phi_j^n)_t - (\phi_j^{n-1})_t, (\phi_j^n)_t + (\phi_j^{n-1})_t \rangle \\ &= \frac{1}{\tau} [\|(\phi_j^n)_t\|^2 - \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2] \end{aligned} \quad (4.36)$$

eşitliği şeklinde yazılabilir. İç çarpımı alınan ifadede ikinci terim ise

$$\begin{aligned} \left\langle (\phi_j^n)_{x\bar{x}}, \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right\rangle &= \frac{1}{\tau} \langle (\phi_j^n)_{x\bar{x}}, \phi_j^{n+1} \rangle - \frac{1}{\tau} \langle (\phi_j^n)_{x\bar{x}}, \phi_j^{n-1} \rangle \\ &= \frac{1}{\tau} \left[\langle (\phi_j^n)_x, (\phi_j^{n+1})_x \rangle - \langle (\phi_j^n)_x, (\phi_j^{n-1})_x \rangle \right] \end{aligned} \quad (4.37)$$

şeklinde yazılabilir. İç çarpımın tanımından üçüncü terim

$$\left\langle (1 - \theta_1)\phi_j^n, \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right\rangle = \frac{(1 - \theta_1)h}{\tau} \sum_{j=1}^N (\phi_j^n \phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1} \phi_j^n) \quad (4.38)$$

eşitliği ile, dördüncü terim ise

$$\begin{aligned} & \left\langle (\theta_1 - \theta_2) \frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^{n-1}}{2}, \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right\rangle \\ &= \frac{\theta_1 - \theta_2}{2\tau} (\|\phi_j^{n+1}\|^2 - \|\phi_j^{n-1}\|^2) \\ &= \frac{\theta_1 - \theta_2}{2\tau} [\|\phi_j^{n+1}\|^2 + \|\phi_j^n\|^2 - \|\phi_j^n\|^2 - \|\phi_j^{n-1}\|^2] \end{aligned} \quad (4.39)$$

eşitliği ile yazılabilir. Benzer şekilde beşinci terim

$$\begin{aligned} & \left\langle \theta_2 \frac{\phi_j^{n+1} + 2\phi_j^n + \phi_j^{n-1}}{4}, \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right\rangle \\ &= \frac{\theta_2 h}{\tau} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^n}{2} + \frac{\phi_j^n + \phi_j^{n-1}}{2} \right) \left(\frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^n}{2} - \frac{\phi_j^{n-1} + \phi_j^n}{2} \right) \\ &= \frac{\theta_2 h}{\tau} \sum_{j=1}^N \left(\left(\frac{\phi_j^{n+1} + \phi_j^n}{2} \right)^2 - \left(\frac{\phi_j^n + \phi_j^{n-1}}{2} \right)^2 \right) \\ &= \frac{\theta_2}{\tau} (\|\phi_j^{n+1/2}\|^2 - \|\phi_j^{n-1/2}\|^2). \end{aligned} \quad (4.40)$$

eşitliği ile ifade edilir. İç çarpımı alınan terimde altıncı terimin reel kısmı ise

$$\begin{aligned} & \left\langle |\psi_j^n|^2, \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{\tau} \right\rangle = \frac{2}{\tau} \left\langle |\psi_j^n|^2, \frac{(\phi_j^{n+1} - \phi_j^n)}{2} - \frac{(\phi_j^{n-1} - \phi_j^n)}{2} \right\rangle \\ &= \frac{2h}{\tau} \sum_{j=1}^N (|\psi_j^n|^2 \phi_j^{n+1/2} - |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-1/2}) \end{aligned} \quad (4.41)$$

şeklinde elde edilir. Tüm bu eşitliklerde reel kısımlar toplanırsa, bir başka deyişle

(4.36), (4.37), (4.38), (4.39), (4.40) ve (4.41) eşitliklerinden

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau} (\|(\phi_j^n)_t\|^2 - \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2) - \frac{h}{\tau} \sum_{j=1}^N [(\phi_j^n)_x (\phi_j^{n+1})_x - (\phi_j^{n-1})_x (\phi_j^n)_x] \\
& + \frac{(1 - \theta_1)h}{\tau} \sum_{j=1}^N (\phi_j^n \phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1} \phi_j^n) \\
& + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2\tau} (\|\phi_j^{n+1}\|^2 + \|\phi_j^n\|^2 - \|\phi_j^n\|^2 - \|\phi_j^{n-1}\|^2) \\
& + \frac{\theta_2}{\tau} (\|\phi_j^{n+\frac{1}{2}}\|^2 - \|\phi_j^{n-\frac{1}{2}}\|^2) - \frac{2h}{\tau} \sum_{j=1}^N (|\psi_j^n|^2 \phi_j^{n+\frac{1}{2}} - |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-\frac{1}{2}}) = 0
\end{aligned} \tag{4.42}$$

bulunur. (4.35) ve (4.42) eşitlikleri toplanırsa

$$\begin{aligned}
& \frac{4}{3} \|(\psi_j^{n+1})_x\|^2 - \frac{1}{3} \|(\psi_j^{n+1})_{\hat{x}}\|^2 - \frac{4}{3} \|(\psi_j^n)_x\|^2 + \frac{1}{3} \|(\psi_j^n)_{\hat{x}}\|^2 \\
& - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^{n+1}|^2 + 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n+\frac{1}{2}} + (\|(\phi_j^n)_t\|^2 - \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2) \\
& - h \sum_{j=1}^N (\phi_j^n)_x (\phi_j^{n+1})_x - (\phi_j^{n-1})_x (\phi_j^n)_x \\
& + (1 - \theta_1)h \sum_{j=1}^N (\phi_j^n \phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1} \phi_j^n) \\
& + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} [(\|\phi_j^{n+1}\|^2 + \|\phi_j^n\|^2) - (\|\phi_j^n\|^2 + \|\phi_j^{n-1}\|^2)] \\
& + \theta_2 (\|\phi_j^{n+\frac{1}{2}}\|^2 - \|\phi_j^{n-\frac{1}{2}}\|^2) \\
& - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n+\frac{1}{2}} + 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-\frac{1}{2}} = 0
\end{aligned} \tag{4.43}$$

veya

$$\begin{aligned}
& \frac{4}{3} \|(\psi_j^{n+1})_x\|^2 - \frac{1}{3} \|(\psi_j^{n+1})_{\hat{x}}\|^2 - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^{n+1}|^2 \phi_j^{n+\frac{1}{2}} + \|(\phi_j^n)_t\|^2 \\
& - h \sum_{j=1}^N (\phi_j^n)_x (\phi_j^{n+1})_x + (1 - \theta_1) h \sum_{j=1}^N \phi_j^n \phi_j^{n+1} \\
& + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \left(\|\phi_j^{n+1}\|^2 + \|\phi_j^n\|^2 \right) + \theta_2 \|\phi_j^{n+\frac{1}{2}}\|^2 \\
& = \frac{4}{3} \|(\psi_j^n)_x\|^2 - \frac{1}{3} \|(\psi_j^n)_{\hat{x}}\|^2 + \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2 \\
& - h \sum_{j=1}^N (\phi_j^{n-1})_x (\phi_j^n)_x + (1 - \theta_1) h \sum_{j=1}^N \phi_j^{n-1} \phi_j^n \\
& + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \left(\|\phi_j^n\|^2 + \|\phi_j^{n-1}\|^2 \right) + \theta_2 \|\phi_j^{n-\frac{1}{2}}\|^2 - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{4.44}$$

elde edilir.

$$\begin{aligned}
E^n = & \frac{4}{3} \|(\psi_j^n)_x\|^2 - \frac{1}{3} \|(\psi_j^n)_{\hat{x}}\|^2 + \|(\phi_j^{n-1})_t\|^2 - h \sum_{j=1}^N (\phi_j^{n-1})_x (\phi_j^n)_x \\
& + (1 - \theta_1) h \sum_{j=1}^N \phi_j^{n-1} \phi_j^n + \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \left(\|\phi_j^n\|^2 + \|\phi_j^{n-1}\|^2 \right) \\
& + \theta_2 \|\phi_j^{n-\frac{1}{2}}\|^2 - 2h \sum_{j=1}^N |\psi_j^n|^2 \phi_j^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

ile tanımlanırsa, ayrık enerji (4.24) korunumu gösterilmiş olur.

Bölüm 5

KLEIN GORDON ZAKHAROV DENKLEMLERİ İÇİN ENERJİ KORUYAN SONLU FARK TASARISI

Başlangıç-sınır değer problemlerinin sayısal çözümünde, ayrık enerji ve kütle korunumu gibi yapı korunumunu sağlayan ve bu sayede uzun zamanda kararlı sayısal sonuçlar üreten fark şemalarının geliştirilmesine yönelik çalışmalar literatürde giderek artan bir ilgi görmektedir. Sayısal yöntemlerin denklemin enerji ve kütle gibi korunumlarını korumasının yanı sıra, sayısal çözümün varlığı, tekliği ve yakınsaklığı da son yıllarda üzerinde sıklıkla durulan bir konudur. Ancak sayısal çözümü yapılacak denklemin lineer denklem olup olmayışına ve uygulanacak sayısal yöntemin açık yöntem olup olmayışına bağlı olarak, bu teorik analizlerin yapılabilmesi her denklem için mümkün olmayabilir. Bu bölümde Chen ve ark. [53] tarafından Klein Gordon Zakharov kısmi türevli denklemin sayısal çözümü için önerilen ve denklemin ayrık enerjisini koruyan bir sayısal yöntemden bahsedilecektir. Sayısal yöntemin yakınsaklık analizi yine ilgili makaledeki haliyle irdelenecektir.

Klein Gordon Zakharov (KGZ) denkleminin sayısal çözümü için aşağıdaki başlangıç-sınır değer problemi ele alınacaktır [53]:

$$U_{tt} - U_{xx} + U + NU + |U|^2 U = 0, \quad -x_L < x < x_R, \quad 0 \leq t \leq T \quad (5.1)$$

$$N_{tt} - N_{xx} = (|U|^2)_{xx}, \quad -x_L < x < x_R, 0 \leq t \leq T \quad (5.2)$$

$$U|_{t=0} = U_0(x), \quad U_t|_{t=0} = U_1(x), \quad N|_{t=0} = N_0(x), \quad N_t|_{t=0} = N_1(x) \quad (5.3)$$

$$U|_{x=x_L} = U|_{x=x_R} = 0, \quad N|_{x=x_L} = N|_{x=x_R} = 0 \quad (5.4)$$

Burada $U(x, t)$ kompleks değerli $N(x, t)$ ise reel değerli fonksiyonlardır. $U(x, t)$ elektronlar tarafından oluşturulan elektrik alanının hızlı zaman ölçeği bileşenini temsil etmekte, $N(x, t)$ ise iyon yoğunluğunun denge durumundan sapmasını ifade etmektedir.

Başlangıç-sınır değer problemi (5.1)-(5.4)

$$E(t) = \int_{x_L}^{x_R} \left[|U_t|^2 + |U_x|^2 + |U|^2 + N|U|^2 + \frac{1}{2}|V|^2 + \frac{1}{2}|N|^2 + \frac{1}{2}|U|^4 \right] dx \quad (5.5)$$

enerji olarak adlandırılan

$$E(t) = E(t_0) \quad (5.6)$$

enerji korunumuna sahiptir. Burada

$$V = -f_x, \quad f_{xx} = N_t \quad (5.7)$$

ile tanımlanmıştır.

5.1 Ayırık Enerjinin Korunumu

Uzay ve zaman adım uzunlukları sırasıyla $h = \Delta x$ ve $\tau = \Delta t$ olmak üzere, (5.1)-(5.4) başlangıç-sınır değer probleminin sayısal çözümünü daha basit bir şekilde ifade etmek için

$$\begin{aligned} x_j &= x_L + jh, \quad 0 \leq j \leq J = \left\lceil \frac{x_R - x_L}{h} \right\rceil, \\ t^n &= n\tau, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \left\lceil \frac{T}{\tau} \right\rceil, \\ (w_j^n)_x &= \frac{w_{j+1}^n - w_j^n}{h}, \quad (w_j^n)_{\bar{x}} = \frac{w_j^n - w_{j-1}^n}{h}, \\ (w_j^n)_t &= \frac{w_j^{n+1} - w_j^n}{\tau}, \quad (w_j^n)_{\bar{t}} = \frac{w_j^n - w_j^{n-1}}{\tau}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

notasyonları tanımlansın. Kompleks iç çarpım, p -normu ve sonsuz norm ise sırasıyla

$$\langle w^n, u^n \rangle = h \sum_{j=0}^J w_j^n \bar{u}_j^n, \quad \|w^n\|_p^p = h \sum_{j=0}^J |w_j^n|^p, \quad \|w^n\|_\infty = \sup_{0 \leq j \leq J} |w_j^n|. \quad (5.9)$$

olarak tanımlansınlar. İlerleyen bölümlerde basitlik olması bakımından $\|w^n\|_2$ normu indisi ihmal edilerek $\|w^n\|$ ile gösterilecektir.

Lemma 1. w_j ve v_j $j = 0, 1, \dots, J$ olmak üzere iki ayrık fonksiyon olsunlar. Bu durumda

$$h \sum_{j=1}^{J-1} w_j (v_j)_{x\bar{x}} = -h \sum_{j=1}^{J-1} (w_j)_x (v_j)_x - w_0 (v_0)_x + w_J (v_J)_{\bar{x}} \quad (5.10)$$

eşitlikleri sağlanır.

(5.1)-(5.4) başlangıç-sınır değer probleminin sayısal çözümü için Chen ve ark.[53] tarafından

$$\begin{aligned} & (U_j^n)_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12} (U_j^n)_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2} (U_j^{n+1} + U_j^{n-1})_{x\bar{x}} + \frac{1}{2} (U_j^{n+1} + U_j^{n-1}) \\ & + \frac{1}{2} N_j^n (U_j^{n+1} + U_j^{n-1}) + \frac{1}{4} (|U_j^{n+1}|^2 + |U_j^{n-1}|^2) (U_j^{n+1} + U_j^{n-1}) = 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$(N_j^n)_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12} (N_j^n)_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2} (N_j^{n+1} + N_j^{n-1})_{x\bar{x}} = (|U_j^n|^2)_{x\bar{x}} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} U_j^0 &= U_0(x_j), \quad N_j^0 = N_0(x_j), \\ U_0^n &= U_J^n = 0, \quad N_0^n = N_J^n = 0 \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$U_j^1 - U_j^{-1} = 2\tau U_1(x_j), \quad N_j^1 - N_j^{-1} = 2\tau N_1(x_j) \quad (5.14)$$

sonlu fark tasarısı önerilmiştir. Burada $U_t|_{t=0} = U_1(x)$ ve $N_t|_{t=0} = N_1(x)$ başlangıç koşulları zamana göre ikinci mertebeden sonlu fark tasarısı ile ayrıklaştırılmıştır. (5.7) eşitliğindeki türevlerin

$$(f_j^n)_{x\bar{x}} = (N_j^n)_t, \quad j = 1, 2, \dots, J-1, \quad f_0^n = f_J^n = 0 \quad (5.15)$$

şeklinde ayrıklaştırıldığını kabul edelim.

Teorem 6. *Ayrık enerji*

$$\begin{aligned} E^n &= \|U_t^n\|^2 - \frac{h^2}{12} \|U_{xt}^n\|^2 + \frac{1}{2} (\|U_x^{n+1}\|^2 + \|U_x^n\|^2) \\ &+ \frac{1}{2} (\|U^{n+1}\|^2 + \|U^n\|^2) + \frac{1}{2} h \sum_{j=1}^{J-1} (N_j^n |U_j^{n+1}|^2 + N_j^{n+1} |U_j^n|^2) \\ &+ \frac{1}{4} (\|U^{n+1}\|_4^4 + \|U^n\|_4^4) + \frac{1}{2} \|f_x^n\|^2 - \frac{h^2}{24} \|N_t^n\|^2 \\ &+ \frac{1}{4} (\|N^{n+1}\|^2 + \|N^n\|^2) \end{aligned} \quad (5.16)$$

olmak üzere (5.11)-(5.14) fark şeması aşağıdaki korunum özelliğine sahiptir:

$$E^n = E^{n-1} = \dots = E^0 = \text{sabit} \quad (5.17)$$

İspat: (5.11) denkleminin $U^{n+1} - U^{n-1}$ ile iç çarpım alınıp, ardından reel kısmı alınrsa, Lemma ve homojen sınır koşulları yardımıyla

$$\begin{aligned} & \|U_t^n\|^2 - \|U_t^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12} (\|U_{xt}^n\|^2 - \|U_{xt}^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2} (\|U_x^{n+1}\|^2 - \|U_x^{n-1}\|^2) \\ & + \frac{1}{2} (\|U^{n+1}\|^2 - \|U^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2} h \sum_{j=1}^{J-1} N_j^n (|U_j^{n+1}|^2 - |U_j^{n-1}|^2) \\ & + \frac{1}{4} (\|U^{n+1}\|_4^4 - \|U^{n-1}\|_4^4) = 0 \end{aligned} \quad (5.18)$$

elde edilir. Daha sonra (5.12) ile $\frac{1}{2}(f^n + f^{n-1})$ iç çarpım yapıp (5.15) eşitliğinden yararlanılırsa

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (\|f_x^n\|^2 - \|f_x^{n-1}\|^2) - \frac{h^2}{24} (\|N_t^n\|^2 - \|N_t^{n-1}\|^2) + \frac{1}{4} (\|N^{n+1}\|^2 - \|N^{n-1}\|^2) \\ & + \frac{1}{2} h \sum_{j=1}^{J-1} |U_j^n|^2 (N_j^{n+1} - N_j^{n-1}) = 0 \end{aligned} \quad (5.19)$$

bulunur. (5.18) ve (5.19) denklemleri toplanırsa (5.17) enerji korunumu elde edilir.

5.2 Sonlu Fark Tasarı için Bazı Ön Kestirimler

Bu bölümde (5.11)-(5.15) sonlu fark tasarısı için bazı ön tahminler verilecektir.

Lemma 3(Gronwall Eşitsizliği): B_ℓ , ($\ell = 1, 2, \dots, N$) negatif olmayan sabitler olmak üzere $\{w(n), \rho(n), n = 1, 2, \dots, N, N\tau = T\}$ şeklindeki negatif olmayan ayrık fonksiyonlarının

$$w(n) \leq \rho(n) + \tau \sum_{\ell=1}^n B_\ell w(\ell) \quad (5.20)$$

eşitsizliğinin sağlandığı kabul edilsin. $0 \leq n \leq N$ için:

$$w(n) \leq \rho(n) \exp \left(n\tau \sum_{\ell=1}^n B_\ell \right) \quad (5.21)$$

eşitsizliği sağlanır.

Teorem 7. $U_0(x) \in H^1$, $U_1(x) \in L^2$, $N_0(x) \in H^1$, $N_1(x) \in L^2$ olmak üzere

$$\begin{aligned} \|U_t^n\| &\leq C, \quad \|U_x^n\| \leq C, \quad \|U^n\| \leq C, \quad \|U^n\|_\infty \leq C, \\ \|f_x^n\| &\leq C, \quad \|N^n\| \leq C, \quad \|U^n\|_4 \leq C. \end{aligned} \quad (5.22)$$

kestirimler geçerlidir [53].

5.3 Sonlu Fark Tasarısının Yakınsaklığı

Bu bölümde (5.11)–(5.14) sonlu fark tasarısının yakınsaklığı Chen ve arkadaşlarının [53] ele aldığı şekliyle irdelenecektir. Yerel kesme hataları

$$\begin{aligned} r_j^n &= (U(x_j, t^n))_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12}(U(x_j, t^n))_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2}(U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1}))_{x\bar{x}} \\ &\quad + \frac{1}{2}(U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})) + \frac{1}{2}N(x_j, t^n)(U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})) \\ &\quad + \frac{1}{4}(|U(x_j, t^{n+1})|^2 + |U(x_j, t^{n-1})|^2) \times (U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})), \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \sigma_j^n &= (N(x_j, t^n))_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12}(N(x_j, t^n))_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2}(N(x_j, t^{n+1}) + N(x_j, t^{n-1}))_{x\bar{x}} \\ &\quad - (|U(x_j, t^n)|^2)_{x\bar{x}}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

ile gösterilsinler. $U(x, t)$ ve $N(x, t)$ yeteri kadar türevlenebilir fonksiyonlar olmak üzere yerel kesme hataları

$$|r_j^n| + |\sigma_j^n| = O(\tau^2 + h^2) \quad (5.25)$$

eşitliğini sağladığı gösterilebilir. Bir başka deyişle (5.11)–(5.14) sonlu fark tasarısı uzay ve zaman değişkenine göre ikinci basamaktan sayısal yöntemdir.

(5.1)–(5.4) başlangıç-sınır değer probleminin (x_j, t_n) noktasındaki çözümü $U(x_j, t_n)$, $N(x_j, t_n)$ ile (5.11)–(5.14) sonlu fark tasarısının (x_j, t_n) noktasındaki çözümü ise U_j^n , N_j^n ile gösterilsin. e_j^n ve η_j^n (x_j, t_n) noktasındaki hata terimlerini göstermek üzere

$$\begin{aligned} e_j^n &= U(x_j, t^n) - U_j^n, \\ \eta_j^n &= N(x_j, t^n) - N_j^n, \\ \frac{1}{h^2}(F_{j+1}^n - 2F_j^n + F_{j-1}^n) &= \frac{1}{\tau}(\eta_j^{n+1} - \eta_j^n), \quad j = 1, 2, \dots, J-1, \\ F_0^n &= F_J^n = 0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

tanımlansın.

Teorem 8. (5.11)–(5.14) sonlu fark tasarısının çözümü (5.1)–(5.4) başlangıç-sınır değer probleminin çözümüne $\mathcal{O}(h^2 + \tau^2)$ metrebeden yakınsar [53].

İspat :(5.11) eşitliğinden (5.23) çıkarılırsa

$$\begin{aligned} r_j^n &= (e_j^n)_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12}(e_j^n)_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2}(e_j^{n+1} + e_j^{n-1})_{x\bar{x}} \\ &\quad + \frac{1}{2}(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) \\ &\quad + \frac{1}{2}\eta_j^n(U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})) \\ &\quad + \frac{1}{2}N_j^n(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) + L_1, \end{aligned} \quad (5.27)$$

veya

$$\begin{aligned} &(e_j^n)_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12}(e_j^n)_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2}(e_j^{n+1} + e_j^{n-1})_{x\bar{x}} + \frac{1}{2}(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) \\ &= r_j^n - \frac{1}{2}\eta_j^n(U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})) - \frac{1}{2}N_j^n(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) - L_1 \end{aligned} \quad (5.28)$$

elde edilir. Her iki eşitlikte de L_1

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{1}{4}(|U(x_j, t^{n+1})|^2 + |U(x_j, t^{n-1})|^2) \times (U(x_j, t^{n+1}) + U(x_j, t^{n-1})) \\ &\quad - \frac{1}{4}(|U_j^{n+1}|^2 + |U_j^{n-1}|^2)(U_j^{n+1} + U_j^{n-1}) \\ &= \frac{1}{4}(|U(x_j, t^{n+1})|^2 + |U(x_j, t^{n-1})|^2)(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) \\ &\quad + \frac{1}{4}[|U(x_j, t^{n+1})|^2 + |U(x_j, t^{n-1})|^2 - |U_j^{n+1}|^2 - |U_j^{n-1}|^2] \\ &\quad \cdot (U_j^{n+1} + U_j^{n-1}) \\ &= \frac{1}{4}(|U(x_j, t^{n+1})|^2 + |U(x_j, t^{n-1})|^2)(e_j^{n+1} + e_j^{n-1}) \\ &\quad + \frac{1}{4}[U(x_j, t^{n+1})\bar{e}_j^{n+1} + e_j^{n+1}\bar{U}_j^{n+1} \\ &\quad + e_j^{n-1}\bar{U}_j^{n-1} + U(x_j, t^{n-1})\bar{e}_j^{n-1}](U_j^{n+1} + U_j^{n-1}). \end{aligned} \quad (5.29)$$

eşitliği ile tanımlanmıştır. (5.28) denkleminin $(e^{n+1} - e^{n-1})$ ile iç çarpımı yapıp reel kısmı alınırsa

$$\begin{aligned} &\|e_t^n\|^2 - \|e_t^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12}(\|e_{xt}^n\|^2 - \|e_{xt}^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2}(\|e_x^{n+1}\|^2 - \|e_x^{n-1}\|^2) \\ &+ \frac{1}{2}(\|e^{n+1}\|^2 - \|e^{n-1}\|^2) \leq C\tau \left(\|r^n\|^2 + \|\eta^n\|^2 + \|N^n(e^{n+1} + e^{n-1})\|^2 \right. \\ &\quad \left. + \|e_t^n\|^2 + \|e_t^{n-1}\|^2 + \|e^{n+1}\|^2 + \|e^{n-1}\|^2 \right). \end{aligned} \quad (5.30)$$

elde edilir. Ayırık Sobolev eşitsizliği [53] ve ön kestirimler (5.22) yardımıyla

$$\begin{aligned}
\|N^n(e^{n+1} + e^{n-1})\| &\leq C\|N^n\| \cdot \|e^{n+1} + e^{n-1}\|_\infty \\
&\leq C\|e_x^{n+1} + e_x^{n-1}\| + C\|e^{n+1} + e^{n-1}\| \\
&\leq C(\|e_x^{n+1}\| + \|e_x^{n-1}\| + \|e^{n+1}\| + \|e^{n-1}\|).
\end{aligned} \tag{5.31}$$

elde edilir. Son iki eşitsizlikten

$$\begin{aligned}
&\|e_t^n\|^2 - \|e_t^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12} (\|e_{xt}^n\|^2 - \|e_{xt}^{n-1}\|^2) \\
&+ \frac{1}{2} (\|e_x^{n+1}\|^2 - \|e_x^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2} (\|e^{n+1}\|^2 - \|e^{n-1}\|^2) \\
&\leq C\tau (\|r^n\|^2 + \|\eta^n\|^2 + \|e_x^{n+1}\|^2 \\
&+ \|e_x^{n-1}\|^2 + \|e^{n+1}\|^2 + \|e^{n-1}\|^2 + \|e_t^n\|^2 + \|e_t^{n-1}\|^2).
\end{aligned} \tag{5.32}$$

sonucuna ulaşılabilir. Benzer şekilde (5.24) denkleminde (5.12) denklemini çıkarıldığında

$$(\eta_j^n)_{t\bar{t}} + \frac{h^2}{12} (\eta_j^n)_{x\bar{x}t\bar{t}} - \frac{1}{2} (\eta_j^{n+1} + \eta_j^{n-1})_{x\bar{x}} = \sigma_j^n + (|U(x_j, t^n)|^2 - |U_j^n|^2)_{x\bar{x}}. \tag{5.33}$$

elde edilir. (5.33) denkleminin $\frac{1}{2}(F^n + F^{n-1})$ ile iç çarpım yapırsa

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{2\tau} (\|F_x^n\|^2 - \|F_x^{n-1}\|^2) + \frac{h^2}{24\tau} (\|\eta_t^n\|^2 - \|\eta_t^{n-1}\|^2) - \frac{1}{4\tau} (\|\eta^{n+1}\|^2 - \|\eta^{n-1}\|^2) \\
&= \left(\sigma_j^n, \frac{1}{2}(F^n + F^{n-1}) \right) + \left((|U(x_j, t^n)|^2 - |U_j^n|^2)_{x\bar{x}}, \frac{1}{2}(F^n + F^{n-1}) \right)
\end{aligned} \tag{5.34}$$

eşitliği bulunur.

$$\begin{aligned}
&\left((|U(x_j, t^n)|^2 - |U_j^n|^2)_{x\bar{x}}, \frac{1}{2}(F^n + F^{n-1}) \right) \leq C (\|F_x^n\|^2 + \|F_x^{n-1}\|^2 + \|e_x^n\|^2 + \|e^n\|^2), \\
&(\sigma^n, \frac{1}{2}(F^n + F^{n-1})) = \frac{1}{2}h \sum_{j=1}^{J-1} \sigma_j^n (F_j^n + F_j^{n-1}) \leq C (\|\sigma^n\|^2 + \|F_x^n\|^2 + \|F_x^{n-1}\|^2).
\end{aligned}$$

eşitsizliği ve (5.34) denkleminde yararlanılarak

$$\begin{aligned}
&\|F_x^n\|^2 - \|F_x^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12} (\|\eta_t^n\|^2 - \|\eta_t^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2} (\|\eta^{n+1}\|^2 - \|\eta^{n-1}\|^2) \\
&\leq C\tau (\|\sigma^n\|^2 + \|F_x^n\|^2 + \|F_x^{n-1}\|^2 + \|e_x^n\|^2 + \|e^n\|^2)
\end{aligned} \tag{5.35}$$

elde edilir. (5.32) ile (5.35) denklemleri toplanır

$$\begin{aligned}
& \|e_t^n\|^2 - \|e_t^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12} (\|e_{xt}^n\|^2 - \|e_{xt}^{n-1}\|^2) + \frac{1}{2} (\|e_x^{n+1}\|^2 - \|e_x^{n-1}\|^2) + \\
& \frac{1}{2} (\|e^{n+1}\|^2 - \|e^{n-1}\|^2) + \|F_x^n\|^2 - \|F_x^{n-1}\|^2 - \frac{h^2}{12} (\|\eta_t^n\|^2 - \|\eta_t^{n-1}\|^2) \\
& + \frac{1}{2} (\|\eta^{n+1}\|^2 - \|\eta^{n-1}\|^2) \leq C\tau (\|r^n\|^2 + \|\eta^n\|^2 + \|\sigma^n\|^2 \\
& + \|e_x^{n+1}\|^2 + \|e_x^n\|^2 + \|e_x^{n-1}\|^2 \\
& + \|e^{n+1}\|^2 + \|e^n\|^2 + \|e^{n-1}\|^2 + \|e_t^n\|^2 + \|e_t^{n-1}\|^2 + \|F_x^n\|^2 + \|F_x^{n-1}\|^2).
\end{aligned} \tag{5.36}$$

sonucuna ulaşılır.

$$\begin{aligned}
B^n &= \|e_t^n\|^2 - \frac{h^2}{12} \|e_{xt}^n\|^2 + \frac{1}{2} (\|e_x^{n+1}\|^2 + \|e_x^n\|^2) + \frac{1}{2} (\|e^{n+1}\|^2 + \|e^n\|^2) \\
&+ \|F_x^n\|^2 - \frac{h^2}{12} \|\eta_t^n\|^2 + \frac{1}{2} (\|\eta^{n+1}\|^2 + \|\eta^n\|^2)
\end{aligned}$$

olsun.

$$\begin{aligned}
B^n &\geq \frac{2}{3} \|e_t^n\|^2 + \frac{1}{2} (\|e_x^{n+1}\|^2 + \|e_x^n\|^2) + \frac{1}{2} (\|e^{n+1}\|^2 + \|e^n\|^2) + \frac{2}{3} \|F_x^n\|^2 \\
&+ \frac{1}{2} (\|\eta^{n+1}\|^2 + \|\eta^n\|^2)
\end{aligned} \tag{5.37}$$

olduğu gösterilebilir. Sayısal yöntemin yerel kesem hatası $\mathcal{O}(h^2 + \tau^2)$ olduğundan (5.36) eşitsizliğinden

$$\begin{aligned}
B^n - B^{n-1} &\leq C\tau (\|r^n\|^2 + \|\sigma^n\|^2) + C\tau (B^n + B^{n-1}) \\
&\leq C\tau (h^2 + \tau^2)^2 + C\tau (B^n + B^{n-1}).
\end{aligned} \tag{5.38}$$

elde edilir. (5.38) denkleminin n üzerine toplamı alınır ve Gronwal eşitsizliği uygulanırsa

$$B^N \leq (B^0 + C(h^2 + \tau^2)^2) \exp(CN\tau) \leq C (B^0 + (h^2 + \tau^2)^2). \tag{5.39}$$

elde edilir. Böylece (5.37) denkleminde

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{3} \|e_t^N\|^2 + \frac{1}{2} (\|e_x^{N+1}\|^2 + \|e_x^N\|^2) + \frac{1}{2} (\|e^{N+1}\|^2 + \|e^N\|^2) + \frac{2}{3} \|F_x^N\|^2 \\
& + \frac{1}{2} (\|\eta^{N+1}\|^2 + \|\eta^N\|^2) \leq C (B^0 + (h^2 + \tau^2)^2).
\end{aligned} \tag{5.40}$$

bulunur. Yaklaşımlar ikinci mertebe doğruluğa sahip olduğundan $B^0 = O(h^2 + \tau^2)^2$ yazılabilir. Sonuç olarak (5.40) eşitsizliğinden

$$\|e_x^N\| \leq O(h^2 + \tau^2), \quad \|e^N\| \leq O(h^2 + \tau^2), \tag{5.41}$$

$$\|e_t^N\| \leq O(h^2 + \tau^2), \quad \|\eta^N\| \leq O(h^2 + \tau^2). \quad (5.42)$$

kestirimleri bulunur. Sonuç olarak ayrık Sobolev eşitsizliğinden

$$\|e_x^N\|_\infty \leq O(h^2 + \tau^2). \quad (5.43)$$

elde edilir.



Bölüm 6

SAYISAL SONUÇLAR

Bu bölümde beş tane enerji koruyan kompakt yöntem, (4.11) OVA yöntemi, (4.12) BOVA yöntemi, (4.15) Ek-BOVA yöntemi, (4.16) BOVA-B bileşke yöntemi, (4.17) BOVA-T toplam yöntemi ile ilgili sayısal sonuçlar verilecektir. Ayrık enerji ve kütle korunumlarındaki hatalar

$$RH^n = |(H^n - H^0)/H^0|, \quad RM^n = |(M^n - M^0)/M^0| \quad (6.1)$$

bağlı hatalar ile ölçülecektir. Burada sırasıyla $H^n = H(Q^n, V^n, P^n, \Phi^n)$ (4.10) ayrık Hamiltonu, $M^n = M(Q^n, P^n)$ ise (4.13) ayrık kütle temsil etmektedir. H^0 ve M^0 , $t = 0$ anındaki başlangıç değerleri H^n ve M^n ise $t = t_n$ anındaki ayrık değerleri göstermektedir. KGS denkleminin sayısal çözümleri için hata

$$e_\infty(\psi(t_n)) = \|\psi(t_n) - \psi^n\|_\infty, \quad e_\infty(\phi(t_n)) = \|\phi(t_n) - \phi^n\|_\infty. \quad (6.2)$$

ile ölçülecektir. KGS denklemi için (4.1)-(4.3) başlangıç-sınır değer problemini

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{1-c^2}} \text{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}} (x - ct - x_0) \right) \exp \left(i \left(cx + \frac{1-c^2+c^4}{2(1-c^2)} t \right) \right), \\ \phi(x, t) &= \frac{3}{4(1-c^2)} \text{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}} (x - ct - x_0) \right) \end{aligned} \quad (6.3)$$

soliton çözüme sahiptir. Burada $|c| < 1$ dalga hızının yayılma hızıdır ve x_0 başlangıç fazını temsil eder. Soliton dalga profillerine ait tüm sayısal simülasyonlarda, diğer sonlu fark tasarımları ile elde edilen dalga profilleri benzer olduğundan, sadece kompakt BOVA şeması (4.12) ile elde edilen sonuçlar gösterilecektir.

	τ	$e_\infty(\phi)$	order	$e_\infty(\psi)$	order
OVA	1/10	3.531310e-03	—	5.774787e-03	—
	1/11	2.931657e-03	1.9526	4.775481e-03	1.9936
	1/12	2.473494e-03	1.9530	4.013723e-03	1.9972
	1/13	2.115706e-03	1.9520	3.419997e-03	1.9999
BOVA	1/10	3.211935e-02	—	7.599502e-02	—
	1/11	2.901042e-02	1.0213	6.949625e-02	0.8878
	1/12	2.644590e-02	1.0157	6.401309e-02	0.8905
	1/13	2.429518e-02	1.0132	5.932615e-02	0.8933
BOVA-B	1/10	8.210417e-04	—	8.430187e-04	—
	1/11	6.851074e-04	1.8906	6.760921e-04	2.1478
	1/12	5.817526e-04	1.8912	5.524118e-04	2.1526
	1/13	5.013390e-04	1.8898	4.589771e-04	2.1462
BOVA-T	1/10	1.935742e-03	—	4.084042e-03	—
	1/11	1.609453e-03	1.8912	3.376916e-03	1.9011
	1/12	1.360462e-03	1.8905	2.837704e-03	1.9002
	1/13	1.166192e-03	1.8898	2.417390e-03	1.8994

Tablo 6.1: Sabit $h = 0.125$ için $T = 1$ anındaki hatalar ve sayısal yöntemleri zamansal basamakları.

6.1 Tek Soliton

İlk olarak bir solitonun yayılımı incelenecektir. Başlangıç koşulları

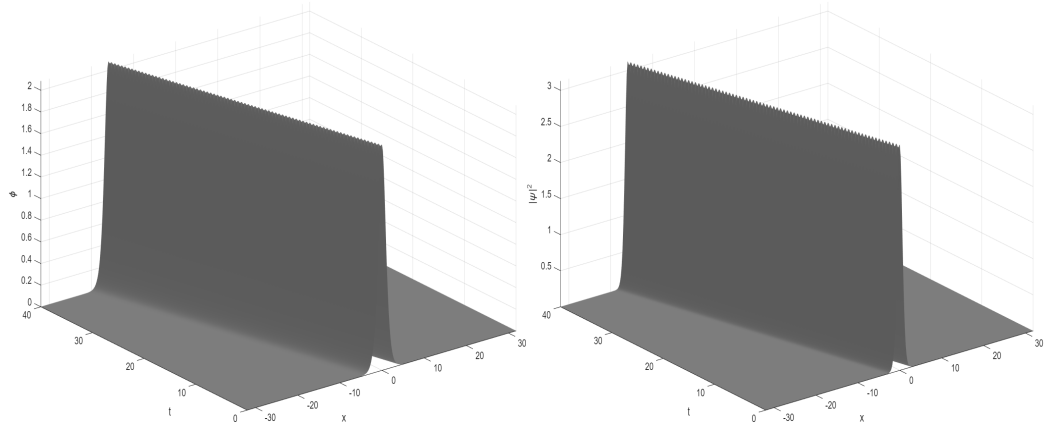
$$\begin{aligned}
\psi(x, 0) &= \frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{1-c^2}} \text{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}}(x - x_0) \right) \exp(icx), \\
\phi(x, 0) &= \frac{3}{4(1-c^2)} \text{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}}(x - x_0) \right), \\
\phi_t(x, 0) &= \frac{3v}{4(1-c^2)^{3/2}} \text{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}}(x - x_0) \right) \tanh \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c^2}}(x - x_0) \right)
\end{aligned} \tag{6.4}$$

$t = 0$ için tam çözüm (6.3)'den alınmıştır. Burada $c = -0.8$ alınacaktır. Tablo 6.1, $-50 \leq x \leq 50$ aralığında $h = 0.125$ ve $T = 1$ için sayısal yöntemler ile tam çözüm arasındaki hataları vermektedir. Tablodan görülebileceği gibi, BOVA yöntemi zamansal olarak birinci mertebeden, diğer tüm sayısal yöntemler ise zamansal olarak ikinci mertebededir. Yöntemlerin kararlılığı, uzaysal adım boyutu h ve zamansal adım boyutu τ kullanarak farklı $r = \tau/h$ oranlarında test edilmiştir. BOVA yön-

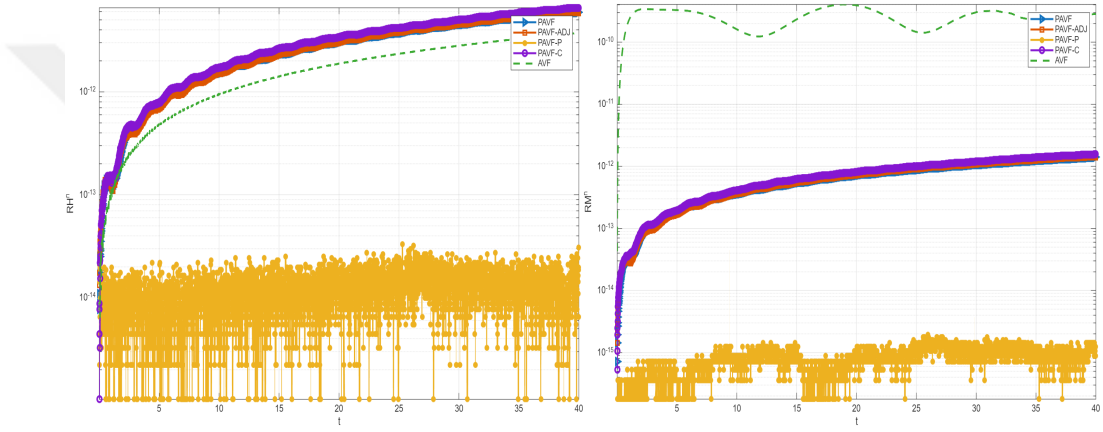
$h = 0.2$	$\tau = h$	$\tau = h/2$	$\tau = h/4$
OVA	3.574313e-02	9.858316e-03	3.126925e-03
BOVA	7.230295e-02	2.461892e-02	9.577223e-03
BOVA-B	5.475593e-03	2.041844e-03	1.971309e-03
BOVA-T	2.245555e-02	6.39937e-03	2.291053e-03
$h = 0.1$	$\tau = h$	$\tau = h/2$	$\tau = h/4$
OVA	8.945973e-03	2.302452e-03	6.158300e-04
BOVA	2.379871e-02	8.756432e-03	3.623246e-03
BOVA-B	1.201833e-03	3.418482e-04	1.273630e-04
BOVA-T	5.677344e-03	1.464343e-03	4.088853e-04

Tablo 6.2: $\phi(x, t)$ için kararlılık testi: $T = 3$ anında farklı $r = \tau/h$ oranlarda $e_\infty(\phi)$ hataları.

teminin ayırık kütleli koruması, yöntemin $\Psi(x, t)$ değişkeninin hesaplamasına göre koşulsuz kararlı olduğu anlamına gelir. Bu nedenle KGS denkleminde diğer bileşen olan $\phi(x, t)$ için kararlılık testine odaklanılacaktır. Tablo 6.2, farklı $r = \tau/h$ oranları $e_\infty(\phi)$ hatalarını göstermektedir. Tablodan görüleceği uzaysal adım boyutu h ve zamansal adım boyutu τ küçüldükçe hatalar küçülmekte ve sayısal bir patlama ve kararsızlık gözlemlenmemektedir. Tablo 6.1 ve Tablo 6.2 ile sayısal yöntemlerin doğruluğunu gösterdikten sonra, soliton dalganın uzum zaman diliminde ilerleyişine bakılabilir. Şekil 6.1, $-32 \leq x \leq 32$ aralığında başlangıçta uzaysal konumu $x_0 = 0$ olan bir solitonun $0 \leq t \leq 40$ zaman aralığındaki ilerleyişini göstermektedir. Şekilden de görüleceği gibi dalganın boyutunda herhangi bir artma ya da sönümlenme görülmemekte ve dalganın ilerleyişi boyunca küçükte olsa salınımlar gözlenmemektedir. Şekil 6.2, (6.1) bağıl enerji RH^n ve bağıl kütle RM^n hatalarını göstermektedir. Şekilden korunan büyüklüklerin (4.10) ve (4.13) tüm şemalar tarafından korunduğu görülmektedir. Ayrıca, tüm kompakt BOVA yöntemlerinin kütle korunumu açısından kompakt OVA yöntemine göre daha üstün olduğu gözlenmektedir.



Şekil 6.1: $\tau = 0.01$, $h = 0.2$ için kompakt BOVA yöntemi (4.12) ile elde edilen tek soliton profilleri.



Şekil 6.2: Dört enerji koruyan yöntemin, tek solitonun evrimi için bağıl enerji hatası ve bağıl kütle hatası $\tau = 0.01$, $h = 0.2$.

	OVA	BOVA	BOVA-T	BOVA-B
T=2	35.9648	2.6311	19.2738	3.6248
T=4	61.0073	3.9045	35.9958	7.3234
T=6	98.3374	5.2441	54.1268	11.7569
T=8	121.697552	6.7319	71.9398	16.0587
T=10	163.915267	15.014625	89.2549	19.7762

Tablo 6.3: $\tau = 0.1$ zaman adım büyüklüğü ile elde edilen CPU süreleri.

Farklı zaman adımları için yöntemleri hesaplama süreleri (CPU) Tablo 6.3’de gös-

terilmiştir. OVA ve BOVA-T yöntemleri lineer kapalı yöntemler olduğundan, BOVA yöntemi ile BOVA-B yönteminin hesaplama sürelerinin karşılaştırılması daha adil olacaktır. Öte yandan, OVA ve BOVA-T yöntemleri kapalı yöntemler olduğundan, bu iki yöntemin kendi aralarında karşılaştırılması daha uygundur. Tabloya göre, lineer olmayan yöntemleri CPU süreleri beklendiği gibi lineer kapalı şemalardan daha yüksektir. Ayrıca, BOVA-B yöntemi her zaman adımında hem BOVA hem de onun ek şemasını çağırmasına rağmen, BOVA-B yönteminin CPU süresi, BOVA yönteminin süresinin iki katından oldukça küçüktür. Bu sonuç [56] makalesindeki sonuçlarla da uyumludur.

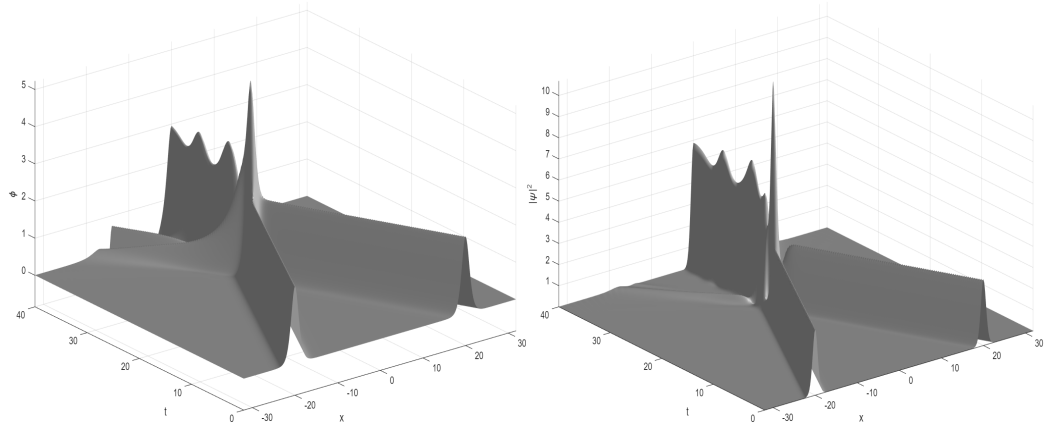
6.2 İki Solitonun Çarpışması

Bu bölümde aşağıdaki başlangıç koşulları kullanılarak iki çarpışan solitonun dinamiği incelenecektir.

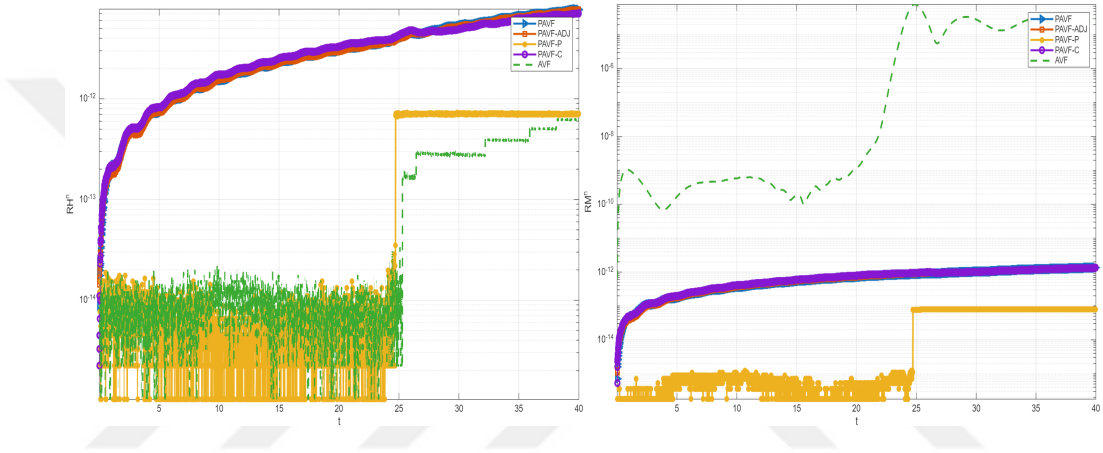
$$\begin{aligned}\psi(x, 0) &= \sum_{i=1}^2 \left(\frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{1-c_i^2}} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c_i^2}}(x-x_i) \right) \exp(ic_i x) \right), \\ \phi(x, 0) &= \sum_{i=1}^2 \left(\frac{3}{4(1-c_i^2)} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c_i^2}}(x-x_i) \right) \right), \\ \phi_t(x, 0) &= \sum_{i=1}^2 \left(\frac{3c_i}{4(1-c_i^2)^{3/2}} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c_i^2}}(x-x_i) \right) \right. \\ &\quad \left. \times \tanh \left(\frac{1}{2\sqrt{1-c_i^2}}(x-x_i) \right) \right)\end{aligned}\tag{6.5}$$

İki solitonun etkileşimi $[0, 40]$ zaman aralığında Şekil 6.3'de gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü üzere, tekil dalgalar genliklerinin değişmesiyle birlikte başlangıçtaki yönlerinde ilerlemektedir ve etkileşim inelastiktir. İlgili enerji ve kütle korunumu Şekil 6.4'de gösterilmiştir. Şekilden, kompakt OVA yöntemi ve kompakt BOVA-T yönteminin enerji korunumu hatasında etkileşimin gerçekleştiği $t \approx 25$ anında hızlı bir artış olduğu görülmektedir. Ayrıca, kompakt BOVA yöntemlerinin kütleli tam olarak koruduğu ve bunun Teorem 4'ü doğruladığı görülmektedir. Öte yandan, kütle korunumu hatası kompakt OVA yönteminin kütleli tam olarak korumadığını göstermektedir. Bu sonuçlar [56]'deki sonuçlarla da tutarlıdır.

Tablo 6.4, iki solitonun çarpışması durumunda kompakt yöntemlerin CPU sürelerini göstermektedir. Görülebileceği üzere gerek tek solitonun ilerlemesi gerekse soliton-



Şekil 6.3: Dört enerji koruyan yöntem kullanılarak elde edilen iki solitonun profilleri, $\tau = 0.01$, $h = 0.2$.



Şekil 6.4: İki solitonun evrimi için dört enerji koruyan yöntemin bağıl enerji hatası ve bağıl kütle hatası $\tau = 0.01$, $h = 0.2$.

ları çarpışma senaryoları zamansal olarak $t \in [0, 40]$ aralığında gerçekleştiğinden, çarpışma senaryosunda yöntemlerin CPU süreleri, Tablo 6.3'deki CPU süresi ile ne-redeyse aynıdır.

	OVA	BOVA	BOVA-T	BOVA-B
T=2	35.9422	2.4491	18.2326	4.0851
T=4	72.5606	4.0973	34.6110	7.6351
T=6	105.0767	6.1507	51.9199	11.3036
T=8	135.2441	8.9579	71.6805	14.6767
T=10	166.637534	11.0029	88.8790	20.3929

Tablo 6.4: İki solitonun arpışmasında CPU süreleri, $\tau = 0.1$.

Bölüm 7

SONUÇ

Bu tez çalışmasında, Klein Gordon Schrödinger (KGS) denkleminin sayısal çözümü için bazı yeni yapı koruyucu kompakt sonlu fark yöntemleri önerilmiştir. KGS denklemini uzayda dördüncü mertebeden kompakt bir şema kullanılarak ayrıklaştırılmış ve sonlu boyutlu bir Hamilton sistem elde edilmiştir. Daha sonra, yarı-ayrık sistem zaman içinde enerji koruyan Ortalama Vektör Alanı (OVA) yöntemi ve enerji koruyan Bölünmüş Ortalama Vektör Alanı (BOVA) yöntemleri ile ayrıklaştırılmıştır. Ayrıca, BOVA yöntemi ile ilişkili Ek yöntem (Ek-BOVA), BOVA bileşim (BOVA-B) yöntemi ve BOVA Toplam (BOVA-T) yöntemleri de tanıtılmıştır. Kompakt BOVA yönteminin yalnızca KGS denkleminin enerjisini korumakla kalmadığı, aynı zamanda ayrık kütleyi de tam olarak koruduğu gösterilmiştir. Sayısal sonuçlarla uzun zamanda yöntemlerin doğruluğu ve etkinliği ortaya konulmuştur.

KAYNAKÇA

- [1] Turner, M. J., Clough, R. W., Martin, H. C., Topp L., Stiffness and deflection analysis of complex structures. *Journal of Aeronautical Sciences*, (1956), 23(9).
- [2] Fish, J., Belytschko, T., *A First Course in Finite Elements*, John Wiley & Sons, Chichester, England, (2007).
- [3] Mokhtari, R., Isvand, D., Chegini, N. G., Salaripanah, A., Numerical solution of the Schrödinger equations by using Delta-shaped basis functions, *Nonlinear Dynamics*, (2013), 74(1-2).
- [4] Russell, J. S., Report of the Fourteenth Meeting of the British Association for the Advancement of Science, Report on Waves, John Murray, London, 1844.
- [5] Dias, F. and Bridges, T., Weakly nonlinear wave packets and the nonlinear Schrödinger equation.
- [6] Ablowitz, M. J. and Ladik, J. F., Nonlinear differentail-difference equations, *Journal of Mathematical Physics*, 16, 598-603, 1975.
- [7] Weideman, J. A. C. and Herbst, B. M., Split-step methods for the solition of the Nonlinear Schrödinger Equation, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23, 485-507, 1986.
- [8] Chen, J. B., Qin, M. Z. and Tang, Y. F., Symplectic and Multi-Symplectic Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation, *Computers and Mathematics with Applications*, 43, 1095-1106, 2002.
- [9] Celledoni, E., Grimm, V., McLachlan, R. I., McLaren, D. I., O’Neale, D. R. J., Owren B. and Quispel, G. R. W., Preserving energy resp. dissipation in nume-

- rical PDEs, using the Average Vector Field method, *Journal of Computational Physics*, 20, 6770-6789, 2012
- [10] Fukuda, I., Tsutsumi, M., On the Yukawa-coupled Klein-Gordon-Schrödinger equations in three space dimensions, *Proc. Jpn. Acad.* 51 (1975) 402–405.
 - [11] Fukuda, I., Tsutsumi, M., On coupled Klein-Gordon-Schrödinger equations II, *J. Math. Anal. Appl.* 66 (1978) 358–378.
 - [12] Fukuda, I., Tsutsumi, M., On coupled Klein-Gordon-Schrödinger equations III. Higher order interaction, decay and blow-up, *Math. Jpn.* 24 (1979) 307–321.
 - [13] Biler, P., Attractors for the system of Schrödinger and Klein–Gordon equations with Yukawa coupling, *SIAM J. Math. Anal.* 21 (1990) 1190–1212.
 - [14] Guo, B., Global solution for some problem of a class of equations in interaction of complex Schrödinger field and real Klein–Gordon field, *Sci. China Ser. A* 25 (1982) 97–107.
 - [15] Ozawa, T., Tsutsumi, Y., Asymptotic behaviour of solutions for the coupled Klein–Gordon–Schrödinger equations, *Adv. Stud. Pure Math.* 23 (1994)
 - [16] Zhang, L., Convergence of a conservative difference scheme for a class of Klein-Gordon-Schrödinger equations in one space dimension, *Appl. Math. Comput.* 163 (2005) 343–355.
 - [17] Wang, S., Zhang, L., A class of conservative orthogonal spline collocation schemes for solving coupled Klein–Gordon–Schrödinger equations, *Appl. Math. Comput.* 203 (2008) 799–812.
 - [18] Xiang, X., Spectral method for solving the system of equations of Schrödinger–Klein–Gordon field, *J. Comput. Appl. Math.* 21 (1988) 161–171.
 - [19] Bao, W., Yang, L., Efficient and accurate numerical methods for the Klein–Gordon–Schrödinger equations, *J. Comput. Phys.* 225 (2007) 1863–1893.
 - [20] Dehghan, M., Taleei, A., Numerical solution of the Yukawa-coupled Klein–Gordon–Schrödinger equations via a Chebyshev pseudospectral multidomain method, *Appl. Math. Model.* 36 (2012) 2340–2349.

- [21] Kong, L., Liu, R., Xu, Z., Numerical simulation of interaction between Schrödinger field and Klein–Gordon field by multisymplectic method, *Appl. Math. Comput.* 181 (1) (2006) 342–350.
- [22] Kong, L., Zhang, J., Cao, Y., Duanc, Y., Huang, H., Semi-explicit symplectic partitioned Runge–Kutta Fourier pseudo-spectral scheme for Klein–Gordon–Schrödinger equations, *Comput. Phys. Comm.* 181 (2010) 1369–1377.
- [23] Hong, J., Jiang, S., Li, C., Explicit multi-symplectic methods for Klein–Gordon–Schrödinger equations, *J. Comput. Phys.* 228 (9) (2009) 3517–3532.
- [24] Zhang, L. and Chang, Q., Convergence and stability of a conservative finite difference scheme for a class of equation system in interaction of complex Schrödinger field and real Klein-Gordon field. *Num. Math. J. Chinese Universities* 22.3 (2000): 362-370.
- [25] Zhang, J., Kong, L., New energy-preserving schemes for Klein–Gordon–Schrödinger equations, *Applied Mathematical Modelling*, 40(15–16), (2016), 6969-6982, <https://doi.org/10.1016/j.apm.2016.02.026>.
- [26] R. LeVeque. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. SIAM, 2007.
- [27] N. Ottosen, H. Petersson: *Introduction to the Finite Element Method*, Prentice-Hall (1992).
- [28] L.N. Trefethen. *Spectral Methods in MATLAB*. SIAM, 2000.
- [29] Wazwaz, A. M., *Solitary Waves Theory. In: Partial Differential Equations and Solitary Waves Theory*. Library of congress control number:2009920462, Heidelberg, 1-761, 2009
- [30] Akkoyunlu, C., Lineer Olmayan Schrödinger Denkleminin Enerji Korumalı Yöntemlerle Çözümü ve Model Indirgeme Yönteminin Uygulanması, Temmuz 2013
- [31] Courant, R., Friedrichs K. and Lewy, H., On the partial difference equations of mathematical physics, *BIT Numerical Mathematics*, 51, 91-101, 2011.

- [32] Karasözen B. and Erdem, Ö., Energy preserving methods for Volterra lattice equation, *J. App. Eng. Math.*, 1, 169-179, 2011.
- [33] Karasözen, B. and Şimşek, G., Energy preserving integration of Bi-Hamiltonian partial differential equations, *J. App. Eng. Math.*, 1, 75-86, 2011.
- [34] McLachlan, R.I. and Quispel, Q.R.W., Geometric integration using discrete gradients, 357, 1021–1046, 1999
- [35] McLaren, D. I. and Quispel, G. R. W., Integral-preserving integrators, *J. Phys. A: Math Gen.*, 37, 489-495, 2004.
- [36] Quispel, G.R.W., McLaren, D.I., A new class of energy-preserving numerical integration methods, *J.Phys. A: Math. Theor.*, 41, 045206, 2008.
- [37] Cai, W., Li, H., Wang, Y., Partitioned AVF methods. arXiv preprint arXiv:1708.08059, School of Mathematical Sciences, Peking University, Beijing, 100871, China 2017.
- [38] Aydın, A. and Karasözen, B., *Symplectic and Multi-symplectic methods for coupled nonlinear Schrödinger equations with periodic solutions*, Computer Physics Communications, 177, 566-583, 2007.
- [39] Ismail, M.S. and Taha, T.R., *Numerical simulation of coupled nonlinear Schrödinger equation*, Math. Comput. Simulation, 56, 547-562, 2001.
- [40] Xu, Y. and Shu, C. W., *Local discontinuous Galerkin methods for nonlinear Schrödinger equations*, Journal of Computational Physics, 205, 72-97, 2005.
- [41] Hairer, E., Lubich C. and Wanner, G., *Geometric Numerical Integration Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, 31. Springer, New York, 2002
- [42] Bayram M., 2009. *Nümerik Analiz*, Birsen Yayınevi, İstanbul.
- [43] Leimkuhler B. and Reich, S., *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge University Press, 2005.
- [44] Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G., *Geometric Numerical Integration*, volume 31 of Springer Series in Computational Mathematics. Springer, 2001.

- [45] Hoffmann, K. A. and Chiang, S. T., Computational fluid dynamics. Volume III *Engineering education system.*,(2000).
- [46] Lele, S. K., Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution, *Journal of Computational Physics*, 103, 1-42 (1992).
- [47] Sari, M. and Gürarşlan, G., *A sixth-order compact finite difference scheme to the numerical solutions of burgers' equation.* *Applied Mathematics and Computation* 208(2), 475-483, (2009).
- [48] Sari, M., Gürarşlan, G. and Dağ, İ., *A compact finite difference method for the solution of the generalized burgers-fisher equation.* *Numerical Methods for Partial Differential Equations: An International Journal* 26(1), 125-134, (2010).
- [49] Gurarşlan, G., Karahan, H., Alkaya, D., Sari, M. and Yasar, M., *Numerical solution of advection-diffusion equation using a sixth-order compact finite difference method.* *Mathematical Problems in Engineering* 2013.
- [50] He, Yuyu, Wang, Xiaofeng, Dai, Weizhong, Deng, Yaqing, A new high-order accurate conservative finite difference scheme for the coupled nonlinear Schrödinger equations, 13 May 2021
- [51] Kong, L., Chen, M., Yin, X., A novel kind of efficient symplectic scheme for Klein-Gordon-Schrödinger equation, *Applied Numerical Mathematics*, 135, (2019), 481-496.
- [52] Pan, X., Zhang, L., High-order linear compact conservative method for the nonlinear Schrödinger equation coupled with the nonlinear Klein–Gordon equation, *Nonlinear Analysis* 92 (2013) 108-118
- [53] Chen, J., Zhang, L., Two Energy Conserving Numerical Schemes for the Klein-Gordon-Zakharov Equations, *Journal of Applied Mathematics*, Volume 2013, Article ID 462018, 13 pages
- [54] Dehghan, M., Mohebbi, A., Asgari, Z, Fourth-order compact solution of the nonlinear Klein–Gordon equation, *Numer. Algorithms* 52 (2009) 523–540.

- [55] Xie, S., Li, G., Yi, S., Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 198 (2009) 1052–1060.
- [56] Cai, W., Li, H., Wang, Y., Partitioned averaged vector field methods, *Journal of Computational Physics*, 370 (2018) 25–42.
- [57] Wang, T., Jiang, Y., Point-wise errors of two conservative difference schemes for the Klein-Gordon-Schrödinger equation, *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, 17 (2012), 4565-4575
- [58] Siegmund S., Nowak, C., Diblik J., A Generalized Picard-Lindelöf theorem, *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations*, 2016, No. 28,1-8
- [59] Bao W., Yang L., Efficient and accurate numerical methods for the Klein-Gordon-Schrödinger equations, *Journal of Computational Physics* 225 (2007), 1863-1893

ÖZGEÇMİŞ

2011 yılında Balıkesir Üniversitesi Necatibey Eğitim Fakültesi Matematik Öğretmenliği bölümünden mezun oldu. 2019 yılında İstanbul Kültür Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Matematik-Bilgisayar Anabilim Dalı'nda yüksek lisans programına başladı ve 2021 yılında mezun oldu. 2021 yılında İstanbul Kültür Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Matematik-Bilgisayar Anabilim Dalı'nda Matematik doktora programına başladı.

