

تحلیل معادله شرودینگر وابسته به زمان سه بعدی به روش بدون المان

پتروف-گالرکین محلی

محمد جواد محمودآبادی¹، فریده شجاعی اکبر آبادی^{2*}، زهرا آروسته²

¹ دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی، سیرجان، ایران

² دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

دریافت: 1396/05/03 ویرایش نهایی: 1396/11/26 پذیرش: 1397/02/03

چکیده

در این مقاله، تحلیل معادله شرودینگر وابسته به زمان در فضای سه بعدی، به روش بدون المان پتروف-گالرکین محلی بر پایه شکل ضعیف محلی و تقریب حداقل مربعات متحرک ارائه شده است. همچنین تابع آزمون مورد استفاده در روش مورد نظر، تابع پله هویساید در نظر گرفته می‌شود. نقاط گره‌ای در سرتاسر دامنه کلی که به صورت مکعبی است به طور منظم پخش می‌شوند که این نقاط برای تقریب متغیرهای مرزی و داخلی مورد استفاده قرار می‌گیرند. زیر دامنه‌های محلی نیز به شکل مکعبی می‌باشند. به دلیل اینکه از تقریب حداقل مربعات متحرک استفاده می‌شود برای اعمال شرایط مرزی اساسی، تکنیک ضریب جریمه ناشی از تقریب MLS که فاقد خاصیت تابع دلتای کرونکر بوده، به کار رفته است. از روش تفاضل متناهی پیشرو برای گسسته‌سازی عبارت زمانی در معادلات استفاده شده است. به علاوه، مقایسه نتایج حاصل با جواب‌های دقیق، در چند حالت عددی بیانگر موفقیت این روش در تحلیل معادله شرودینگر وابسته به زمان در فضای سه بعدی است.

کلیدواژه‌گان: معادله شرودینگر وابسته به زمان، فضای سه بعدی، بدون المان پتروف-گالرکین محلی، شکل ضعیف، تقریب حداقل مربعات متحرک

مقدمه

در این راستا روش‌های تفاضل محدود، المان محدود، حجم محدود و المان‌های مرزی بارها توسط محققین برای حل عددی معادلات حاکم مورد استفاده قرار گرفته‌اند [1]. از آنجا که ساختار این روش‌ها همگی وابسته به شبکه‌بندی دامنه است استفاده از آن‌ها در تحلیل مسائل با هندسه پیچیده بسیار مشکل و پرهزینه است. هر یک از این روش‌ها در شبیه‌سازی مسائل، مخصوصاً مرزهای متغیر با زمان دارای مشکلات خاصی می‌باشند به طوری که در هر گام زمانی نیاز به شبکه‌بندی مجدد بوده و این امر مستلزم صرف وقت فراوان برای ایجاد شبکه و در نتیجه بالا رفتن هزینه محاسباتی است. علاوه بر این، نیاز به نگاشت متغیرهای میدان نیز وجود

معادله شرودینگر، معادله‌ای است که چگونگی تغییر حالت کوآنتومی یک سیستم فیزیکی را توصیف می‌کند. این معادله یک معادله موج ریاضی است که بر اساس حرکت‌های موج پاسخ داده شده است. معادله شرودینگر خطی و غیرخطی به طور گسترده در مکانیک کوآنتومی، اپتیک، زلزله شناسی، فیزیک پلاسما و غیره استفاده می‌شود. روش‌های عددی تجزیه و تحلیل برای هر دو معادله خطی و غیرخطی شرودینگر به طور گسترده بررسی شده است. تقریباً امروزه در همه علوم استفاده از روش‌های عددی امری اجتناب‌ناپذیر بوده که

* نویسنده مسئول: fshojaei@uk.ac.ir

دارد که منجر به محاسبات اضافی و کاهش دقت می‌شود. از این رو در سال‌های اخیر توجه فراوانی به روش‌های بدون شبکه شده است.

روش‌های بدون شبکه، دسته جدیدی از روش‌های عددی هستند که توانایی خود را در حل مسائل عددی به خوبی نشان داده‌اند. [2]

ویژگی مشترک تمامی آن‌ها، تقریب متغیر میدان با استفاده از یک مجموعه گره در دامنه مسئله بدون نیاز به شبکه از پیش تعریف شده است. این روش‌ها، بر اساس نوع تعریف توابع شکل و چگونگی حداقل کردن توابع تقریب (شکل قوی و یا شکل ضعیف) تقسیم‌بندی می‌شوند. ایده اولیه روش‌های بدون شبکه به روش هیدرودینامیک ذرات هموار برای مدل‌سازی پدیده‌های فیزیک نجومی برمی‌گردد که در سال 1977 توسط گینگلد و مناقات ارائه شد [3]. تحقیقات بر روی روش‌های بدون المان به صورت جدی اولین بار با ارائه روش المان گسترده به وسیله ویلان توزات نایرولز در سال 1992 آغاز شد [4]. از روش‌های بدون شبکه واقعی می‌توان به روش بدون المان پتروف گالرکین محلی اشاره کرد که برای حل مسائل مرزی خطی و غیرخطی بسط داده شده است [5]. این روش، که برای تقریب متغیر میدان و نیز انتگرال‌گیری عددی ماتریس‌های سیستم، به کار می‌رود، نیازی به شبکه‌بندی حتی از نوع پس زمینه ندارد. در واقع در این روش، به جای ارضای معادلات در فرم ضعیف بر روی کل دامنه، مسئله که منجر به انتگرال‌گیری بر روی کل دامنه میدان می‌شود، معادلات بر روی دامنه‌های محلی حول هر گره نوشته می‌شوند، لذا نیازی به شبکه پس‌زمینه بر روی کل دامنه نیست. از جمله پژوهش‌های انجام شده در فضای دو بعدی، می‌توان به کار برادران و محمودآبادی اشاره نمود که مسئله دو بعدی مربوط به انتقال حرارت پایا را با استفاده از روش بدون شبکه

پتروف-گالرکین محلی تحلیل کرده‌اند [6]. باترا و همکاران تحلیل دو بعدی ضربه به جامدات را انجام داده‌اند [7]. دهقان و میرزایی از روش بدون شبکه پتروف-گالرکین محلی برای حل عددی معادله شرودینگر غیرخطی دو بعدی استفاده کرده‌اند [8]. علی‌رغم اینکه استفاده از روش پتروف-گالرکین محلی برای حل معادلات در فضای سه بعدی به دلیل پیچیدگی دامنه مسئله در سه بعد و مخصوصاً تداخل زیر دامنه‌های محلی با مرزها مشکلات زیادی دارد افرادی پژوهش‌هایی در فضای سه بعدی داشته‌اند. برادران و محمودآبادی مسئله دو بعدی مربوط به انتقال حرارت پایا را با استفاده از روش بدون شبکه پتروف-گالرکین محلی تحلیل کرده‌اند [9]. شیوانیان معادله موج غیر خطی را در سه بعد تحلیل کرده است [10]. در این مقاله به منظور حل معادله شرودینگر وابسته به زمان در فضای سه بعدی، از روش بی‌شبکه پتروف-گالرکین محلی بر پایه روش تقریب حداقل مربعات متحرک استفاده شده است. دامنه کلی و زیردامنه‌های محلی به شکل مکعب در نظر گرفته شده است. تابع آزمون مورد نظر تابع پله هویساید می‌باشد. به دلیل اینکه از تقریب حداقل مربعات متحرک استفاده می‌شود برای اعمال شرایط مرزی اساسی تکنیک ضریب جریمه به کار رفته و از روش تفاضل متناهی پیشرو برای گسسته‌سازی عبارت زمانی در معادلات استفاده شده است. در نهایت در قالب چند حالت متفاوت، نتایج به دست آمده از این روش با نتایج حل دقیق مقایسه خواهند شد.

تقریب حداقل مربعات متحرک

گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل در روش پتروف-گالرکین محلی را می‌توان با استفاده از تقریب حداقل مربعات متحرک انجام داد. این تقریب متشکل از چند

$$B(X) = [W_1(X)p(X_1) \quad W_2(X)p(X_1) \quad \dots \quad W_n(X)p(X_n)] \quad 7$$

$$U_s = \{u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n\}^T \quad 8$$

بیان می‌شوند. در این مقاله، تابع وزن مورد استفاده در تقریب حداقل مربعات متحرک تابع وزن اسپلاین است که عبارت است از [3]:

$$W_I(X) = \begin{cases} 1 - 6(d/r)^2 + 8(d/r)^3 - 3(d/r)^4 & 0 \leq d \leq r \\ 0 & r > d \end{cases} \quad 9$$

که r شعاع همسایگی و d فاصله نقطه X از گره X_I می‌باشد. با جای‌گذاری رابطه 5 در رابطه 1، $\Phi_I(X)$ تابع شکل روش در روش پتروف-گالرکین محلی به صورت

$$\Phi_I(X) = \sum_j^m P_j(X) (A^{-1}(X)B(X))_{II} \quad 10$$

بیان می‌شود.

معادله حاکم و شکل ضعیف محلی

در روش مورد نظر، دامنه مورد بررسی توسط یک مجموعه از گره‌ها که با هم هیچ ارتباط از پیش تعیین شده‌ای ندارند تعیین می‌شود.

معادله حاکم

$$i \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial Z^2} \right) = B(X, Y, Z, t) \psi \quad 12$$

با شرط مرزی اساسی

$$\Psi = \Psi_1, \quad \text{on } \Gamma_{qu} \quad 13$$

شرط مرزی طبیعی

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial X} n_x + \frac{\partial \psi}{\partial Y} n_y + \frac{\partial \Psi}{\partial Z} n_z \right) = g, \quad \Gamma_t \quad 14$$

و شرط اولیه

$$\Psi(0) = \Psi_0 \quad 15$$

در نظر گرفته می‌شود.

برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان یک قلمرو سه بعدی Ω با مرز $\Gamma_t \cup \Gamma_U$ در نظر گرفته می‌شود

جزء از قبیل تابع وزن، پایه‌های چند جمله‌ای و یک سری ضرایب می‌باشد. تابع وزن برای هر گره در محدوده مورد بررسی یک دامنه تأثیر تعریف می‌شود و می‌تواند برای تمامی گره‌ها ثابت و یا متغیر باشد. اگر $U(X)$ یک تابع تغییرات میدانی در محدوده مورد بررسی Ω باشد، تقریب $U(X)$ در نقطه X با $U^h(X)$ نشان داده می‌شود. تقریب حداقل مربعات متحرک در ابتدا با تابع میدانی به صورت

$$U^h(X) = \sum_j^m p_j(X) a_j(X) = p^T(X) a(X) \quad 1$$

بیان می‌شود. که در آن X مختصه مورد نظر، $p(X)$ پایه‌های چند جمله‌ای، $a(X)$ ضرایب $p(X)$ و m تعداد تک جمله‌ای‌های تشکیل دهنده $p(X)$ می‌باشد. به طور مثال $p(X)$ و $a(X)$ به صورت

$$p^T(X) = [1 \quad X \quad Y \quad Z] \quad 2$$

$$a(X) = \{a_0(X) \quad a_1(X) \quad a_m(X)\} \quad 3$$

ارائه می‌شوند. در هر نقطه مورد بررسی X ، $a_j(X)$ به گونه‌ای انتخاب می‌شود تا باقی مانده وزنی نرم L_2 را به شکل

$$J = \sum_I^n W(X - X_I) [u^h(X, X_I) - u(X_I)]^2 = \quad 4$$

$$\sum_I^n W(X - X_I) [p^T(X_I) a(X) - u_I]^2$$

حداقل سازد. که در آن $W(X - X_I)$ تابع وزن، n تعداد گره‌های همسایه X که در آن $W(X - X_I) \neq 0$ و u_I پارامتر گره‌ای در گره I ام است. با گرفتن مشتق اول J نسبت به $a_j(X)$ برای حداقل کردن معادله 4، $a(X)$ به صورت

$$a(X) = B(X) U_s A^{-1}(X) \quad 5$$

ارائه می‌گردد. که در آن A, B و U به شکل

$$A(X) = \sum_I^n W(X_I) p(X_I) p^T(X_I) \quad 6$$

$$\int_{\Omega_q} W \left(i \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Z^2} - B \Psi \right) d\Omega \quad 16$$

$$- \alpha \int_{\Gamma_{qu}} W (\Psi_1 - \Psi) d\Gamma_{qu} = 0$$

توجه شود که انتگرال دوم در معادله 16، یک انتگرال خطی است که برای اعمال شرایط مرزی اساسی اضافه شده است. در واقع به دلیل اینکه توابع شکل حداقل مربعات متحرک در روش بی شبکه پتروف-گالرکین محلی فاقد خاصیت تابع دلتای کروئکر هستند، برای اعمال شرایط مرزی اساسی تکنیک ضریب جریمه به کار رفته است. به علاوه در این مقاله ضریب جریمه $\alpha = 10^{10}$ در نظر گرفته شده است. اگر از رابطه 16

$$\text{انتگرال جزء به جزء گرفته شود، رابطه 16 به صورت}$$

$$\int_{\Omega_q} i W \frac{\partial \Psi}{\partial t} d\Omega - \int_{\Omega_q} \left(\frac{\partial W}{\partial X} \frac{\partial \Psi}{\partial X} + \frac{\partial W}{\partial Y} \frac{\partial \Psi}{\partial Y} + \frac{\partial W}{\partial Z} \frac{\partial \Psi}{\partial Z} \right) d\Omega$$

$$+ \int_{\Gamma_q} W \left(\frac{\partial \Psi}{\partial X} n_x + \frac{\partial \Psi}{\partial Y} n_y + \frac{\partial \Psi}{\partial Z} n_z \right) d\Gamma_q - \int_{\Omega_q} W B \Psi d\Omega$$

$$- \alpha \int_{\Gamma_{qu}} W (\Psi_1 - \Psi) d\Gamma_{qu}$$

17

بازنویسی می شود.

با استفاده از تقریب حداقل مربعات متحرک می توان رابطه:

$$\Psi = \sum_{j=1}^m \Phi_j \hat{\Psi}_j \quad 18$$

را نوشت، که در آن $\hat{\Psi}_j$ مقدار تابع موج در نقاط، Ψ مقدار تابع در نقطه دلخواه (X, Y) که داخل و روی مرز ناحیه انتگرالی قرار دارد و Φ_j ها توابع شکل در نقطه (X, Y) هستند و مقدار m بستگی به محل نقطه (X, Y) دارد.

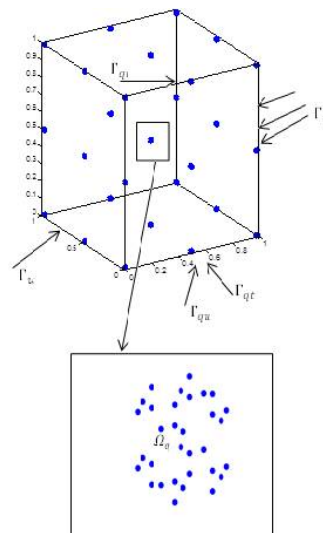
از روش تفاضل متناهی پیشرو برای گسسته سازی عبارت زمانی در معادلات 17 استفاده شده است.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} (X, Y, Z, t^n) = \frac{\Psi^n(X, Y, Z) - \Psi^{n-1}(X, Y, Z)}{\Delta t} \quad 19$$

رابطه 17 را می توان به شکل

$$K \hat{\Psi} = F \quad 20$$

(شکل 1). که در آن Ω کل قلمرو حل، Γ مرز قلمرو، Γ_u مرز شامل شرایط مرزی اساسی، Γ_r مرز شامل شرایط مرزی طبیعی، می باشد. Γ_{qi} شامل ناحیه انتگرال گیری در داخل ناحیه حل بوده که هیچ گونه اشتراکی با مرز ناحیه حل ندارد. همچنین Γ_{qu} شامل ناحیه مشترک بین مرز دامنه انتگرال گیری و بخش شامل شرایط مرزی اساسی است. علاوه بر این، Γ_{qr} شامل ناحیه مشترک بین مرز دامنه انتگرال گیری و قسمت شامل شرایط مرزی طبیعی است. در این مقاله Ω_q زیر دامنه مکعبی برای یک گره در نظر گرفته شده است.

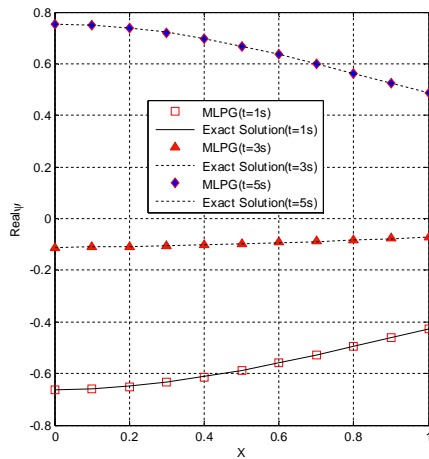


شکل 1. دامنه محاسباتی

که در روابط 12 تا 15، $\Psi(X, Y, Z)$ تابع موج مجهول است. n_x و n_y و n_z بردارهای نرمال عمود بر ناحیه انتگرال گیری، $i = \sqrt{-1}$ عدد موهومی، $T (0 \leq t \leq T)$ زمان نهایی، B و g می توانند توابع مختلطی باشند. برای به دست آوردن شکل ضعیف، معادله 12 در تابع وزن W ضرب شده و از طرفین روی ناحیه محلی انتگرالی Ω_q انتگرال گرفته می شود.

مقایسه می‌شود. درحالت ذکر شده بازه‌های زمانی به صورت $\Delta t = 0/1$ ، مدت زمان حل 5 و 3 و 1، تعداد گره‌ها $n = 125$ ، شعاع ناحیه هر گره $r_0 = 0/05$ و شعاع

همسایگی $r = 1$ ، تعریف شده‌اند. شکل‌های 2 و 3 به ترتیب مقادیر حقیقی و موهومی تابع موج به دست آمده از روش پتروف-گالرکین محلی را با جواب‌های دقیق مربوطه مقایسه می‌کند.



شکل 2. نمودار مقدار حقیقی تابع موج در راستای $X=0/5$

در شکل 2 که مربوط به قسمت حقیقی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 1، 3 و 5 ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند. در 1 ثانیه نمودار به شکل صعودی می‌باشد از 3 ثانیه به بعد نمودار به آرامی صورت نزولی پیدا می‌کند.

در شکل 3 که مربوط به قسمت موهومی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 1، 3 و 5 ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند.

ارائه کرد، که در آن K ماتریس ضرایب $n \times n$ ، Ψ بردار مجهولات $n \times 1$ ، F بردار ستونی $n \times 1$ می‌باشد. رابطه K و F را می‌توان به شکل:

21

$$K_{ij} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_q} i W_i \Phi_j d\Omega - \int_{\Omega_q} \left(\frac{\partial W_i}{\partial X} \frac{\partial \Phi_j}{\partial X} + \frac{\partial W_i}{\partial Y} \frac{\partial \Phi_j}{\partial Y} + \frac{\partial W_i}{\partial Z} \frac{\partial \Phi_j}{\partial Z} \right) d\Omega + \int_{\Gamma_{qu}} W_i \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial X} n_x + \frac{\partial \Phi_j}{\partial Y} n_y + \frac{\partial \Phi_j}{\partial Z} n_z \right) d\Gamma_{qu} + \int_{\Gamma_{qi}} \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial X} n_x + \frac{\partial \Phi_j}{\partial Y} n_y + \frac{\partial \Phi_j}{\partial Z} n_z \right) d\Gamma_{qi} + \alpha \int_{\Gamma_{qu}} W_i \Phi_j d\Gamma_{qu} - \int_{\Omega_q} W_i B \Phi_j d\Omega$$

$$F_i = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_q} i W_i \Phi_j \Psi^{n-1} d\Omega + \alpha \int_{\Gamma_{qu}} W_i \Psi_j d\Gamma_{qu} \quad 22$$

نوشت و n تعداد همه گره‌ها کل ناحیه حل می‌باشد.

حالت اول

در این حالت، معادله 17 با اعمال شرط اولیه

$$\psi(X, Y, Z, 0) = \frac{i}{\cosh X \cosh Y \cosh Z} \quad 23$$

و شرایط مرزی اساسی

24

$$\begin{aligned} i \frac{\exp(it)}{\cosh Y \cosh Z} & X = 0 \\ i \frac{\exp(it)}{\cosh X \cosh Z} & Y = 0 \\ i \frac{\exp(it)}{\cosh X \cosh 1 \cosh Z} & Y = 1 \\ i \frac{\exp(it)}{\cosh 1 \cosh Y \cosh Z} & X = 1 \\ i \frac{\exp(it)}{\cosh X \cosh Y} & Z = 0 \\ i \frac{\exp(it)}{\cosh X \cosh Y \cosh 1} & Z = 1 \end{aligned}$$

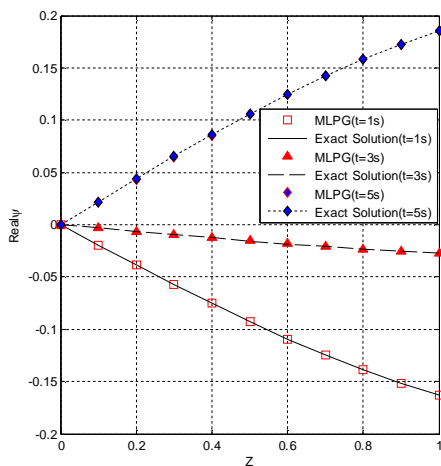
و

$$B = 2 \tanh^2 X + 2 \tanh^2 Y + 2 \tanh^2 Z - 4 \quad 25$$

تحلیل و جواب‌ها با حل دقیق

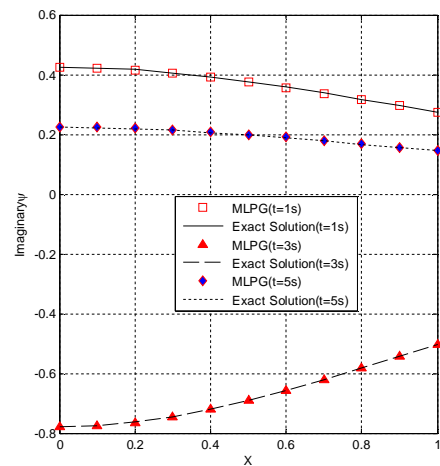
$$\psi(X, Y, Z, t) = i \frac{\exp(it)}{\cosh X \cosh Y \cosh Z} \quad 26$$

در شکل 4 که مربوط به قسمت حقیقی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 1، 3 و 5 ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند. در 1 ثانیه نمودار به شکل نزولی می‌باشد. از یک ثانیه به بعد نمودارها وضعیت صعودی دارند.



شکل 4. نمودار مقدار حقیقی تابع موج در راستای $Z=0.5$

در شکل 5 که مربوط به قسمت موهومی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 1، 3 و 5 ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند. در یک زمانهایی مثلاً نمودار به شکل صعودی می‌باشد. در یک زمانهایی بعد 3 ثانیه نمودار شکل نزولی دارد و در یک زمانهایی بعد از سه ثانیه دوباره نمودار شکل صعودی پیدا می‌کند.



شکل 3. نمودار مقدار موهومی تابع موج در راستای $X=0.5$

حالت دوم

در این حالت، معادله 17 با اعمال شرط اولیه

$$\psi(X, Y, Z, 0) = i \sin X \sin Y \sin Z \quad 27$$

و شرایط مرزی اساسی

$$\begin{cases} 0 & X = 0, \\ 0 & Y = 0, \\ i \sin X \sin 1 \sin Z & Y = 1, \\ i \sin 1 \sin Y \sin Z & X = 1, \\ 0 & Z = 0, \\ i \sin X \sin Y \sin 1 & Z = 1. \end{cases} \quad 28$$

و

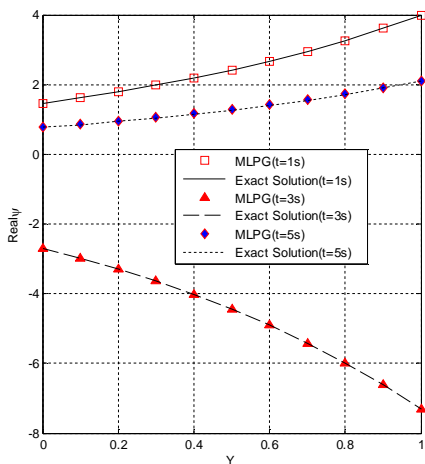
$$B = -4 \quad 29$$

تحلیل و جواب‌ها با حل دقیق

$$\psi(X, Y, Z, t) = i \sin X \sin Y \sin Z \exp(it) \quad 30$$

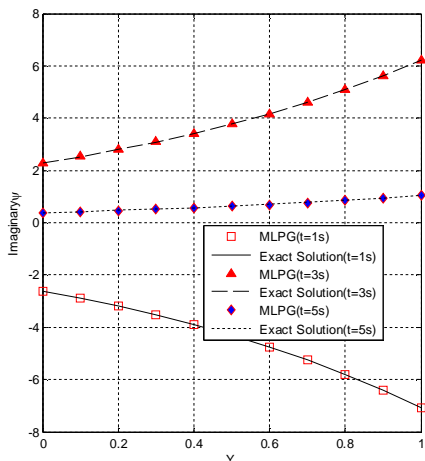
مقایسه می‌شود.

در حالت ذکر شده بازه‌های زمانی به صورت 0.01 ، $\Delta t =$ مدت زمان حل 5 و 3 ، $t = 1$ ثانیه، تعداد گره‌ها $n = 125$ ، شعاع ناحیه هر گره $r_0 = 0.01$ ، شعاع همسایگی $\alpha = 0.9$ تعریف شده‌اند. شکل‌های 4 و 5 به ترتیب مقادیر حقیقی و موهومی تابع موج به دست آمده از روش پتروف-گالرکین محلی را با جواب‌های دقیق مربوطه مقایسه می‌کند.



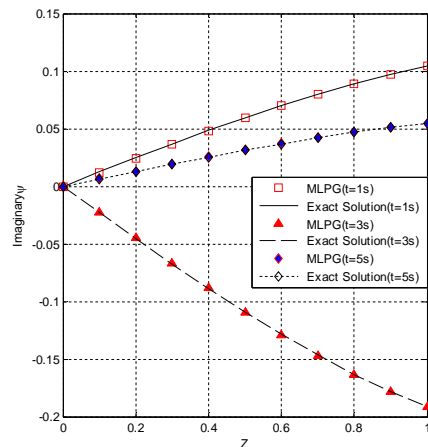
شکل 6. نمودار مقدار حقیقی تابع موج در راستای $Y=0.5$

در شکل 6 که مربوط به قسمت حقیقی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 3.1 و 5 و ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند.



شکل 7. نمودار مقدار موهومی تابع موج در راستای $Y=0.5$

در شکل 7 که مربوط به قسمت موهومی معادله است، مشاهده می‌شود که نمودارهای دقیق با نمودارهایی که از روش پتروف-گالرکین محلی در سه زمان 3.1 و 5 و ثانیه به دست آمده‌اند تطابق خوبی دارند.



شکل 5. نمودار مقدار موهومی تابع موج در راستای $Z=0.5$

حالت سوم

در این حالت، معادله 17 با اعمال شرط اولیه

$$\psi(X, Y, Z, 0) = \exp(X + Y + Z) \quad 31$$

و شرایط مرزی اساسی

$$\begin{cases} i \exp(it + Y + Z) & X = 0, \\ i \exp(it + X + Z) & Y = 0, \\ i \exp(it + X + 1 + Z) & Y = 1, \\ i \exp(it + 1 + Y + Z) & X = 1, \\ i \exp(it + Y + X) & Z = 0, \\ i \exp(it + X + Y + 1) & Z = 1. \end{cases} \quad 32$$

و

$$B = 2 \quad 33$$

تحلیل و جواب‌ها با حل دقیق

$$\psi(X, Y, Z, t) = i \exp(it + X + Y + Z) \quad 34$$

مقایسه می‌شود. در حالت ذکر شده بازه‌های زمانی به صورت $\Delta t = 0.1$ ، مدت زمان حل 5 و 1.3، تعداد گره‌ها $n = 125$ ، شعاع ناحیه هر گره $r_0 = 0.05$ ، شعاع همسایگی $r = 0.9$ ، تعریف شده‌اند. شکل‌های 6 و 7 به ترتیب مقادیر حقیقی و موهومی تابع موج به دست آمده از روش پتروف-گالرکین محلی را با جواب‌های دقیق مربوطه مقایسه می‌کند.

نتیجه گیری

در این مقاله از روش بدون شبکه پتروف-گالرکین محلی برای حل معادله شرودینگر وابسته به زمان در فضای سه بعدی استفاده شد. دامنه کلی و زیردامنه‌های محلی به شکل مکعب در نظر گرفته شد تابع آزمون مورد نظر تابع پله هویساید، به دلیل این که از تقریب حداقل مربعات متحرک استفاده شد برای اعمال شرایط مرزی اساسی تکنیک ضریب جریمه به کار رفت. از روش تفاضل منتهای پیشرو برای گسسته‌سازی عبارت زمانی در معادلات استفاده شد. از طریق رسم نمودار در چند حالت ذکر شده و با مقایسه نتایج حل تقریبی با حل دقیق مشاهده می‌شود که در زمان‌های 1، 3 و 5 ثانیه تطابق خوب بین مقادیر به دست آمده برای توابع از این دو روش بود که این موضوع نشان دهنده دقت بالای روش پتروف-گالرکین محلی است.

مرجع‌ها

- Diffuse Approximation and Diffuse Elements, *Computational Mechanics* **10** (1992) 307-318.
- [5] H. Lin, S.N. Atluri, Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) Method for Convection-Diffusion problems, *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences* **12** (2000) 45-60.
- [6] G.H. Baradaran, M.J. Mahmoodabadi, Optimal Pareto Parametric Analysis of Two-Dimensional Steady-state Heat Conduction Problems by MLPG Method, *International Journal of Engineering* **22** (2009) 387-406.
- [7] D.F. Gilhooley, J.R. Xiao, C.R. Batra, M. A. Mc Carthy, J.W. Gillespie, Two-Dimensional Stress Analysis of Functionally Graded Solids Using The MLPG Method with Radial Basis Functions, *Computational Materials Science* **41** (2008) 467-481.
- [8] M. Dehghan, D. Mirzaei, The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method for the generalized two-dimensional non-linear Schrödinger equation, *Engineering Analysis with Boundary Elements* **32** (2008) 747-756.
- [9] G.H. Baradaran, M.J. Mahmoodabadi, Parametric study of The MLPG Method for The Analysis of Three-Dimensional Steady State Heat Conduction Problems, *Strojnický Casopis, Journal of Mechanical Engineering* **61** 1 (2010) 22-53.
- [10] E. Shivanian, Meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method for three-dimensional nonlinear wave equations via moving least squares approximation, *Engineering Analysis with Boundary Elements* **50** (2015) 249-257.
- [1] J. Wang, Y. Huang, Z. Tian, J. Zhou, Superconvergence analysis of finite element method for the time-dependent Schrödinger equation, *Computational & Applied Mathematics* **71** (2016) 1960-1972.
- [2] C. Duarte, J.T. Odden, An h-p adaptive method using clouds, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **139** (1996) 237-292.
- [3] R.A. Gingold, J.J. Monaghan, Smooth Particle Hydrodynamics: Theory and Application to Non-Spherical Stars, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **181** (1977) 375-389.
- [4] B. Nayroles, G. Touzot, P. Villon, Generalizing the Finite Element Method:

Analysis of the Three-dimensional time-dependent Schrödinger equation by the meshless local Petrov-Galerkin method

Mohamad Javad Mahmoodabadi¹, Farideh Shojaei Akbarabadi^{*2}, Zahra Arasteh²

¹Department of Mechanical Engineering, Sirjan University of Technology, Sirjan, Iran

²Faculty of Physics, University of Shahid Bahonar Kerman, Kerman, Iran

Received: 25.07.2017 Final revised: 15.02.2018 Accepted: 23.04.2018

Abstract

In this paper, the meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method is presented for the numerical solution of the three-dimensional time-dependent Schrödinger equation. The method is based on the local weak form and the moving least squares (MLS) approximation. In this paper, the Heaviside step function is regarded as the test function. Local sub-domains are also considered as cubic shapes. In order to satisfy the essential boundary conditions, the penalty parameter technique is implemented as the MLS approximation can't Kronecker delta function property. The forward finite difference method is used to decompose the time expression of Schrödinger equations. Moreover, the MLPG results of the problem are compared with those obtained by an exact analytical solution showing the efficiency and accuracy of this method.

Keywords: Time-Dependent Schrödinger Equation, Three-Dimensional, Meshless Local Petrov Galerkin, Weak Form, The Least Squares Moving Approximation

* Corresponding Author: fshojaei@uk.ac.ir