KARADENİZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MATEMATİK ANABİLİM DALI

HARMONİK OLMAYAN SALINIM PROBLEMİNİN YAKLAŞIK ÖZDEĞER VE ÖZFONKSİYONLARININ GALERKİN YÖNTEMİYLE HESAPLANMASI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elif BEKAR

TEMMUZ 2008
TRABZON

KARADENİZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MATEMATİK ANABİLİM DALI

HARMONİK OLMAYAN SALINIM PROBLEMİNİN YAKLAŞIK ÖZDEĞER VE ÖZFONKSİYONLARININ GALERKİN YÖNTEMİYLE HESAPLANMASI

Elif BEKAR

Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünce
‘‘Yüksek Lisans (Matematik)’’
Unvanı Verilmesi İçin Kabul Edilen Tezdir.

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: 24.06.2008
Tezin Savunma Tarihi: 11.07.2008

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Haskız COŞKUN

Jüri Üyesi: Prof. Dr. İhsan ÜNVER

Jüri Üyesi: Doç. Dr. Belgin KÜÇÜKÖMEROĞLU

Enstitü Müdür Vekili: Doç. Dr. Salih TERZİOĞLU

Trabzon 2008

ÖNSÖZ

Konunun belirlenmesinden, çalışmanın tamamlanıp bu hale getirilmesine kadar yardımını ve desteğini esirgemeyen hocam Doç. Dr. Haskız COŞKUN' a saygılarımı sunar, emeği için teşekkür ederim.

Ayrıca başta Prof. Dr. Erhan COŞKUN, Öğr. Gör. Ahmet GÖKDOĞAN, Yrd. Doç. Dr. Zafer ÇAKIR, Arş. Gör. Ali Hikmet DEĞER olmak üzere tüm Matematik Bölümü hocalarımla Araştırma Görevlisi arkadaşlarıma; hep yanımda olan aileme ve başta arkadaşlarım Arş. Gör. Ayşe KABATAŞ ile Mustafa Cihat BAŞKAYA olmak üzere tüm arkadaşlarıma, maddi desteğinden dolayı TÜBİTAK' a teşekkür ederim.

Elif BEKAR

Trabzon 2008

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖZET

Bu çalışmada kuantum mekaniğinde önemli bir yeri olan

$$\frac{\hbar^2}{2m}y''-\frac{1}{2}mw^2x^2y-\varepsilon x^4y+\lambda y=0,\quad \lim_{x\to-\infty}y(x)=0,\quad \lim_{x\to+\infty}y(x)=0$$

harmonik olmayan salınım probleminin Λ_n enerji seviyeleri için yaklaşık değerler elde edilmiştir.

Birinci bölümde, Sturm-Liouville problemi ve ilgili teorisine yer verilmiş, bu konuda literatürde bazı önemli teoremler sunulmuştur. Ayrıca bu çalışmada yararlanılan Galerkin yöntemine yer verildikten sonra, problemlere uygulanışı örneklerle gösterilmiştir.

İkinci bölümde ise Galerkin yöntemi bir sisteme dönüştürülmüş ve harmonik olmayan salınım problemi için yaklaşık enerji seviyeleri ile bunlara karşılık gelen özfonksiyonlar belirlenmiştir. Son olarak yöntem, harmonik olmayan salınım probleminin potansiyelinde yer alan εx^4 terimi yerine εx^3 terimi alınarak elde edilen probleme uygulanmıştır.

Anahtar Kelimeler: Sturm-Liouville Problemleri, Galerkin Yöntemi, Kuantum Mekaniği, Harmonik Olmayan Salınım Problemi

SUMMARY

Computation of Approximate Eigenvalues and Eigenfunctions of Anharmonic Oscillator Problem by Galerkin Method

In this thesis, estimated energy levels, Λ_n , are obtained for

$$\frac{\hbar^2}{2m} y'' - \frac{1}{2} mw^2 x^2 y - \varepsilon x^4 y + \lambda y = 0, \quad \lim_{x \to -\infty} y(x) = 0, \quad \lim_{x \to +\infty} y(x) = 0$$

anharmonic oscillator problem that is important for quantum mechanic.

In the first part, Sturm-Liouville problems and related theory are introduced. Some important theorems are stated. Also, Galerkin method that is benefit from for this study is explained and applied for some problems.

In the second part; Galerkin method is transformed into a system and estimated energy levels and related eigenfunctions are determined for anharmonic oscillator problem. Finally, this method is applied for a problem that is obtained by replacing εx^3 with εx^4 in anharmonic oscillator problem.

Keywords: Sturm-Liouville Problem, Galerkin Method, Quantum Mechanic, Anharmonic Oscillator Problem

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

TABLOLAR DİZİNİ

SEMBOLLER DİZİNİ

e	: Euler sayısı, yaklaşık değeri 2,71828183
$\exp(x)$	: $e^{(x)}$
π	: Pi sayısı, yaklaşık değeri 3,14159265
$\mathbb{N}$	: Doğal sayılar kümesi
$\lvert x \rvert$	: x’ in mutlak değeri
$\lVert \Phi_k(x) \rVert$	: $\Phi_k(x)$ fonksiyonunun normu
$x \to \infty$	: x sonsuza yaklaşırken
$x \to x_1^+$	: x, x_1 sayısına sağdan yaklaşırken
$x \to x_2^-$	: x, x_2 sayısına soldan yaklaşırken

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

19. yüzyılın sonlarına doğru, bilinen klasik fizik teorilerinin tüm fiziksel olayları açıklamakta yeterli olduğuna inanılıyordu. Mekanik olaylarını Newton Yasaları, elektrik ve optik olaylarını Maxwell Denklemleri açıklayabiliyordu. Yeni başlamakta olan İstatistik Mekanik teorisi de termodinamik olaylarını açıklamakta başarılı oluyordu [12].

Klasik fiziğin tüm bu önemli gelişimlerine karşın, 20. yüzyılın başlarına gelindiğinde artık klasik fizik ile açıklanamayan bir dizi gözlem bulunmaktaydı. Üstelik bu gözlemlerin anlaşılması için, klasik fizikte yeri olmayan ışığın parçacık özelliği, maddenin dalga özelliği ve fiziksel niceliklerin kesikli (kuantumlu) yapısı gibi yeni kavramlardan söz edilmekteydi. Problemler, özellikle atomlar ve elektronlar gibi küçük parçacıkların işe karıştığı ve bunların elektromanyetik alanlar ile etkileştiği süreçlerde ortaya çıkmaktaydı.

Başlangıçta bu olaylar, amaca uygun özel ve o zamanlar garip görünen bir takım varsayımlarla açıklandı. Bu varsayımların sayıları arttıkça ve aralarındaki ilişkiler belirginleştikçe artık mekaniğin yepyeni bir formülasyonu gerekti.

30 yıl kadar süren bir arayışın sonunda, ‘Kuantum Mekaniği’ denilen yeni bir bilim felsefesi doğdu. Kısaca tanımlamak gerekirse, *Kuantum Mekaniği mikroskobik sistemleri (atom, çekirdek, vs.) matematiksel nesneler cinsinden tanımlayan ve matematiksel nesneleri fiziksel içeriğe dönüştürmek üzere, bir dizi kurallar veren bilimsel bir yöntemdir.*

Kuantum Mekaniği’ nin gelişmesinde önem taşıyan bazı kilometre taşları şunlardır:

Karacisim Işıması (1900, Max Planck),

Fotoelektrik Olayı (1905, Albert Einsten),

Alfa Saçılması ve Atom Modeli (1911, Ernest Rutherford),

Atom Spektrumunun Kuantal Açıklaması (1913, Niels Bohr),

Madde Dalgası Kavramı (1924, Louis de Broglie),

Belirsizlik İlkesi (1927, Werner Heisenberg),

Dalga Denklemi (1927, Erwin Schrödinger).

1927 yılında Schrödinger denkleminin bulunmasıyla esas olarak bugün öğrendiğimiz son halini almış olan, insan aklının gelmiş geçmiş en büyük eserleri arasında sayılan kuantum mekaniği, 20. yüzyılın teknoloji gelişmelerine kaynaklık etmiştir. Nükleer enerji, mikroelektronik aygıtlar, tomografi, lazer gibi uygulamalar ancak kuantum mekaniğinin anlaşılmasıyla anlam kazanır. Fakat kuantum mekaniği teknolojik uygulamalarının çok ötesine geçen başka bir önem de taşımaktadır. Kuantum mekaniği anlayışının gelişmesiyle birlikte yüzyılların birikimiyle gelen ve çok köklü oldukları sanılan klasik fizik kavramlarının sorgulanması kaçınılmaz olmuştur [5].

Bir denge konumu etrafında harmonik salınımlar yapan bir parçacığın hareketi, fiziğin en temel problemlerinden birini oluşturur. Değişik birçok fiziksel sistemin (diatomik moleküllerin titreşimi, kristal örgülerde atomların veya çekirdek içinde nükleonların salınımları, vs.) temel yapısı bir harmonik salınım problemidir. Burada verilecek olan harmonik salınımın kuantal incelenmesi, tüm bu sistemlerin fiziksel davranışlarını doğru olarak tanımlayabilmektedir [12].

Kuantum kavramı kullanılarak ilk olarak 1900 yılında Alman fizikçi Max Planck tarafından harmonik salınım ile ilgili şu hipotez ifade edilmiştir:

‘Bir boyutta υ frekansı ile basit harmonik hareket yapan bir salınım sisteminin kuantum enerjisi aşağıdaki şekilde belirlidir:

$$E_n = nh\upsilon, \; n = 1, 2, 3, ...$$

Burada n’ ye kuantum sayısı denir. $h = 6,626 \times 10^{-34}$ J. s ise Planck sabitidir’. Planck’ in bu hipotezi o dönemde fiziğe çok yeni, çok çarpıcı bir bakış açısı getirmiştir. Bu çarpıcı farklılık kesikli (kuantumlu) enerji kavramını gündeme getirmiştir. Klasik mekanikte ise enerji süreklidir.

Klasik mekanik teorisinde, harmonik salınıma çevremizden de pek çok örnek gösterilebilir. Örneğin, yay-kütle sistemi ideal bir örnek oluşturur. Harmonik salınımlarda, yer değiştirmeye bağlı olarak geri çağırıcı kuvvet

$$F = -mw^2x$$

ile belirlidir. Burada m parçacığın kütlesi, k yay sabiti olmak üzere $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$ açısal frekanstır. Enerji ifadesini bulmak için, $F = -\frac{dV}{dx}$ denkleminde $F = -mw^2x$ kullanılarak integral alındığında, potansiyel enerji

$$V(x) = \frac{mw^2x^2}{2}$$

olarak bulunur. Schrödinger denklemi

$$\tilde{H}\,\Psi = E\Psi,\ \lim_{x\to-\infty}\Psi(x)=0,\ \lim_{x\to+\infty}\Psi(x)=0$$

şeklinde verilir. Burada $\tilde{H}$, hamiltonyeni temsil eder. Hamiltonyen, parçacığın toplam enerjisini veren bir operatördür ve

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + V$$

şeklinde ifade edilir. Operatör simetrik olduğundan, verilen problem diskret özdeğerlere sahiptir. Operatördeki ilk terim kinetik enerjiyi, ikinci terim ise potansiyel enerjiyi temsil eder. Momentum operatörü $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ ve potansiyel enerji $V(x) = \frac{mw^2x^2}{2}$ terimleri Schrödinger denkleminde yerine konursa aşağıdaki denklem elde edilir:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{mw^2x^2}{2}\right)\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x),\ \lim_{x\to-\infty}\Psi_n(x)=0,\ \lim_{x\to+\infty}\Psi_n(x)=0,\ n=0,1,2,...$$

olur. Burada $\hbar$, Planck sabitinin 2π' ye oranıdır. E_n enerji seviyeleri, Ψ_n ise dalga fonksiyonlarıdır [2].

Literatürde, verilen bu problemi çözmek için iki farklı yöntem bulunmaktadır. Birincisi, Schrödinger denklemi çarpanlarına ayırma gibi çeşitli yöntemlerle uygun bir denkleme indirgenir ve kuvvet serisi veya Frobenius yöntemiyle çözülür [3], [5], [7], [11], [12], [13], [18]. İkincisi ise, salınım hamiltonyeni bir takım operatörler cinsinden yazılır ve operatör cebiri yardımıyla sonuca varılır [2], [5], [6], [8], [9], [10], [14], [15], [16], [17].

Yukarıda verilen harmonik salınım problemi çözüldüğünde enerji seviyeleri

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar w,\ n = 0,1,2,...,$$

olarak bulunur. En düşük enerjili durum, klasik fiziğin E=0 beklentisi yerine sonlu $E_0 = \frac{\hbar w}{2}$ enerjili taban durumudur. Buna sıfır-nokta enerjisi de denir. Helyumun 2.7ºK gibi düşük sıcaklıklarda donmadan normal basınçlarda sıvı olarak kalması gibi, pek çok sistemin düşük sıcaklıklardaki bazı davranışlarından bu sıfır-nokta enerjisi sorumludur. Harmonik salınım enerji spektrumunun, bir kovuk içindeki elektromanyetik alan kiplerinin Planck' in öngördüğü $E_n = nh\upsilon$ enerji ifadesi ile benzerliği de bir rastlantı değildir. Çünkü kovuk içindeki elektromanyetik alanların normal kiplerine ayrışımı esas olarak bağlaşımsız harmonik salınım hareketlerine ayrıştırmak demektir [5].

Bu çalışmada da potansiyel enerjisine εx^4 terimi eklenerek harmonik salınım problemi, harmonik olmayan salınım problemine dönüştürülmektedir ve Galerkin yöntemi yardımıyla enerji seviyeleri için yaklaşık çözümler elde edilmektedir. Bu çözümlerde, $\varepsilon = 0$ için, yöntem literatürdeki harmonik salınım probleminin çözümüyle aynı sonuçları vermektedir. Ayrıca, εx^4 terimi yerine kübik εx^3 terimi alınarak benzer yaklaşımlar elde edilmiştir. εx^4 terimi için elde edilen yaklaşımlardan farklı olarak bazı simetrik durumların kaybolduğu gözlenmiştir.

1.2. Sturm-Liouville Teori

L ikinci mertebeden lineer bir operatör olmak üzere, $x \in [x_1, x_2]$ için

$$L := a_0(x)\frac{d^2}{dx^2} + a_1(x)\frac{d}{dx} + a_2(x)$$

olarak tanımlansın. Burada $a_0(x) \neq 0$ ve her bir $a_r(x)$, $[x_1, x_2]$ aralığında süreklidir. λ reel bir parametre olmak üzere $[x_1, x_2]$ aralığında

$$L[y(x)] = \lambda y(x)$$

diferensiyel denklemini ve

$$\left.\begin{aligned} a_{11}y(x_1) + a_{12}y'(x_1) + b_{11}y(x_2) + b_{12}y'(x_2) = 0, \\ a_{21}y(x_1) + a_{22}y'(x_1) + b_{21}y(x_2) + b_{22}y'(x_2) = 0 \end{aligned}\right\}$$

sınır koşullarını sağlayan $y(x)$ leri belirleme problemine özdeğer problemi veya Sturm-Liouville problemi adı verilir. Sınır koşulunda a_{ij} ve b_{ij} katsayıları sabitlerdir. Bu sınır koşuluna ayrılmamış sınır koşulu adı verilir ve sınır koşulundaki iki denklem lineer bağımsız olmalıdır. Yani

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & b_{11} & b_{12} \\ a_{21} & a_{22} & b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$$

matrisinin rankı 2 olmalıdır. $y(x) = 0$ fonksiyonu özdeş olarak $[x_1, x_2]$ aralığında verilen diferensiyel denklemi ve sınır koşullarını sağlar. Bu çözüme özdeğer probleminin trivial çözümü adı verilir. Özdeğer problemlerinde önemli olan nokta ise trivialden (sıfırdan) farklı $y(x)$ çözümünün olup, olmadığıdır. $[x_1, x_2]$ aralığında verilen diferensiyel denklemi ve sınır koşullarını $\lambda = \lambda_0$ ve $y(x) = \Psi(x)$ durumunda sağlayan, λ_0 ve sıfırdan farklı $\Psi(x)$ mevcutsa bu durumda λ_0' a verilen Sturm-Liouville denkleminin özdeğeri, $\Psi(x)$' e ise özfonksiyonu adı verilir. Eğer, bir λ_0 özdeğerine karşılık lineer bağımsız iki özfonksiyon karşılık geliyorsa λ_0 özdeğerine katlı özdeğer, bir tek özfonksiyon karşılık geliyorsa basit özdeğer adı verilir.

Bu bölümde, özdeğer problemleriyle ilgili genel teorik sonuçlara yer verilecektir [1]. Bu amaçla ilk olarak kendine eş diferensiyel denklem kavramı ele alınacaktır.

Tanım 1.1: İkinci mertebeden lineer homojen bir diferensiyel denklem, aşağıdaki formda ifade edilebiliyorsa denkleme kendine eştir denir:

$$p(x)y'' + p'(x)y' + [q(x) + \lambda r(x)]y = 0,\ x_1 < x < x_2,$$

veya denk olarak

$$\frac{d}{dx}[p(x)y'] + [q(x) + \lambda r(x)]y = 0,\ x_1 < x < x_2.$$

Burada $x \in (x_1, x_2)$ için $p(x) > 0,\ r(x) > 0$ ve $x \in [x_1, x_2]$ için $p'(x),\ q(x),\ r(x)$ sürekli fonksiyonlardır.

Kendine eş form, bütün lineer diferensiyel denklemleri kapsayacak kadar geneldir. Örneğin, $[x_1, x_2]$ üzerinde tanımlı

$$A_2(x)y'' + A_1(x)y' + [A_0(x) + \lambda]y = 0, \tag{1.1}$$

özdeğer problemi göz önüne alınsın. (x_1, x_2) üzerinde $A_2 > 0$ ve $[x_1, x_2]$ aralığı üzerinde A_0, A_1 sürekli fonksiyonlar olmak üzere $A_1(x) \neq A_2(x)$ ise denklem kendine eş değildir. Bu durumda denklemin her iki tarafı uygun bir fonksiyonla çarpılarak denklem kendine eş forma dönüştürülebilir. Bunun için denklemin her iki tarafı $\mu(x) = \dfrac{p(x)}{A_2(x)}$ ile çarpılırsa

$$p(x)y'' + \mu(x)A_1(x)y' + \mu(x)[A_0(x) + \lambda]y = 0 \tag{1.2}$$

elde edilir. Buradaki $p(x)$ belirlenecek bir fonksiyondur. (1.2) ile verilen denklemin kendine eş olması için

$$p'(x) = \mu(x)A_1(x) = \frac{p(x)A_1(x)}{A_2(x)} \tag{1.3}$$

olmalıdır. Buradan da $p(x)$ için birinci mertebeden bir diferensiyel denklem olan (1.3) çözülürse:

$$\frac{p'(x)}{p(x)} = \frac{A_1(x)}{A_2(x)} \Rightarrow \int \frac{p'(x)}{p(x)}\,dx = \int \frac{A_1(x)}{A_2(x)}\,dx,$$

buradan da,

$$p(x) = \exp\left[\int \frac{A_1(x)}{A_2(x)}\,dx\right]$$

olarak bulunur. Ayrıca, (1.2) ile Tanım 1.1 deki kendine eş form karşılaştırılırsa:

$$q(x) = \mu(x)A_0(x) = \frac{p(x)A_0(x)}{A_2(x)}$$

ve

$$r(x) = \mu(x) = \frac{p(x)}{A_2(x)}$$

olarak elde edilir.

Genel olarak ikinci mertebeden lineer homojen, kendine eş özdeğer problemi operatör gösterimleri kullanılarak ifade edilir:

$$D = \frac{d}{dx},\; L = D\left[p(x)D\right] + q(x),$$

olarak tanımlanırsa L’ ye kendine eş operatör adı verilir. Böylece kendine eş diferensiyel denklem, kompakt formda

$$L[y] + \lambda r(x)y = 0$$

şeklinde yazılır. Bu bölümden sonraki bütün kısımlarda L sembolü, özel olarak kendine eş diferensiyel operatörü tanımlamak için kullanılacaktır.

Tanım 1.2: L kendine eş operatör olmak üzere, $\left[x_1, x_2\right]$ aralığında tanımlı ikinci mertebeden sürekli türevlere sahip ve sınır değerlerini sağlayan u, v fonksiyonları için

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(uL[v] - vL[u]\right)\,dx = 0$$

eşitliği sağlanıyorsa, L’ ye $\left[x_1, x_2\right]$ aralığında simetrik operatör adı verilir.

Lemma 1.1: (Lagrange Eşitliği): $L = D\left[p(x)D\right] + q(x)$ operatörü $\left[x_1, x_2\right]$ aralığında tanımlansın. u ve v fonksiyonları $\left[x_1, x_2\right]$ aralığı üzerinde ikinci mertebeden türevlenebiliyorsa,

$$uL[v] - vL[u] = \frac{d}{dx}\left[p(x)W(u,v)(x)\right]$$

eşitliği sağlanır. Burada $W(u,v) := uv' - u'v$ Wronskian fonksiyonu olarak adlandırılır.

İspat:

$$L = D\left[p(x)D\right] + q(x)$$

olduğundan,

$$uL[v] - vL[u] = u\frac{d}{dx}(pv') + q(x)uv - v\frac{d}{dx}(pu') - q(x)uv = \frac{d}{dx}(puv' - pu'v).$$

Buradan da,

$$uL[v] - vL[u] = \frac{d}{dx}\left[p(x)W(u,v)(x)\right].$$

Ayrıca Lagrange eşitliğinden:

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(uL[v] - vL[u]\right)\, dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}\left[p(x)W(u,v)(x)\right]\, dx = p(x)W(u,v)(x)\Big|_{x_1}^{x_2}$$

olarak bulunur. Yani,

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(uL[v] - vL[u]\right)\, dx = p(x)W(u,v)(x)\Big|_{x_1}^{x_2}. \tag{1.4}$$

(1.4) eşitliği Green formülü olarak adlandırılır. Aşağıdaki teorem Green formülünün basit bir sonucudur.

Teorem 1.1: $L = D\left[p(x)D\right] + q(x)$ kendine eş operatörünün $\left[x_1, x_2\right]$ aralığı üzerinde simetrik olması için gerek ve yeter koşul

$$p(x)W(u,v)(x)\Big|_{x_1}^{x_2} = 0$$

eşitliğinin sağlanmasıdır. Burada u, v sınır değerlerini sağlayan ve $\left[x_1, x_2\right]$ aralığı üzerinde ikinci mertebeden sürekli türevlere sahip fonksiyonlardır.

İspat: Tanım 1.2 ve (1.4) eşitliğinden, L simetriktir ancak ve ancak

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(uL[v] - vL[u] \right) dx = p(x) W(u,v)(x) \Big|_{x_1}^{x_2} = 0.$$

1.2.1. Simetrik Operatörün Elemanları

Tanım 1.3: f ve g fonksiyonları (x_1, x_2) aralığı üzerinde tanımlı, integrallenebilen fonksiyonlar olmak üzere,

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) g(x) dx = 0$$

eşitliği sağlanıyorsa, f ve g (x_1, x_2) aralığında ortogonaldir denir.

Ortogonallik aşağıda verildiği üzere bir $r(x) > 0$ ağırlık fonksiyonuna göre de tanımlanabilir.

Tanım 1.4: f ve g Tanım 1.3 deki gibi tanımlanan fonksiyonlar ve $r(x) > 0$ olmak üzere,

$$\int_{x_1}^{x_2} r(x) f(x) g(x) dx = 0$$

eşitliği sağlanıyorsa f ve g, r(x) ağırlık fonksiyonuna göre (x_1, x_2) aralığında ortogonaldir denir.

Yukarıdaki tanımlarda ortogonalliğin tanımlı olduğu aralık açık, kapalı, yarı açık, yarı kapalı veya sonsuz olabilir. Aşağıdaki teorem kendine eş bir operatörün farklı özdeğerlerine karşılık gelen özfonksiyonların ortogonalliği üzerinedir. Bu teorem Sturm-Liouville teorisinde yer alan önemli teoremlerden biridir.

Teorem 1.2: (Ortogonallik): L operatörü, $[x_1, x_2]$ üzerinde tanımlı

$$L[y] + \lambda r(x) y = 0, \; x_1 < x < x_2$$

özdeğer probleminin simetrik bir operatörü olsun. λ_n ve λ_k L operatörünün farklı iki özdeğeri olsun ve bu özdeğerlere karşılık gelen özfonksiyonlar sırasıyla $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ ile gösterilsin. Bu durumda $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ ortogonaldir, yani

$$\int_{x_1}^{x_2} r(x) \Phi_n(x) \Phi_k(x) \; dx = 0, \; n \neq k.$$

İspat: $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ özfonksiyonlar ise $L[y]+\lambda r(x)y=0$ denklemini sağlarlar. O halde ,

$$L[\Phi_n(x)] = -\lambda_n r(x)\Phi_n(x), \tag{1.5}$$

$$L[\Phi_k(x)] = -\lambda_k r(x)\Phi_k(x). \tag{1.6}$$

(1.5) denkleminin her iki tarafı $\Phi_k(x)$ ile (1.6) denkleminin her iki tarafı $-\Phi_n(x)$ ile çarpılıp, taraf tarafa toplanır ve $[x_1, x_2]$ üzerinden integral alınırsa:

$$\int_{x_1}^{x_2} \left\{\Phi_k(x)L[\Phi_n(x)] - \Phi_k(x)L[\theta\Phi_k(x)]\right\} dx = (\lambda_k - \lambda_n)\int_{x_1}^{x_2} r(x)\Phi_n(x)\Phi_k(x)\, dx$$

elde edilir. L simetrik olduğundan Tanım 1.2' e göre integralin sağ tarafı sıfırdır. O halde,

$$(\lambda_k - \lambda_n)\int_{x_1}^{x_2} r(x)\Phi_n(x)\Phi_k(x)\, dx = 0. \tag{1.7}$$

Ayrıca hipotezden $\lambda_n \neq \lambda_k$ olduğu (1.7) eşitliğinde kullanılırsa,

$$\int_{x_1}^{x_2} r(x)\Phi_n(x)\Phi_k(x)\, dx = 0$$

elde edilir. Yani $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ ortogonaldir. Sturm-Liouville teorisinde yer alan diğer önemli teoremlerden biri de aşağıda ifade edilen " Simetrik bir operatörün bütün özdeğerlerinin reel olmasıdır."

Teorem 1.3: Simetrik bir operatörün bütün özdeğerleri reeldir.

İspat: Teoremin doğru olmadığı kabul edilsin. Yani bir $\Phi_k(x)$ özfonksiyonuna karşılık λ_k özdeğeri kompleks olsun, yani

$$L[\Phi_k(x)] + \lambda_k r(x)\Phi_k(x) = 0. \tag{1.8}$$

L operatörü reel fonksiyonlardan oluştuğu için, L' nin kompleks eşleniği $\overline{L}$ olmak üzere, $L = \overline{L}$' dir. Bu yüzden (1.8) denkleminin eşleniği alınırsa:

$$\overline{L[\Phi_k(x)] + \lambda_k r(x)\Phi_k(x)} = L\left[\overline{\Phi_k(x)}\right] + \overline{\lambda_k} r(x)\overline{\Phi_k(x)} = 0.$$

Son eşitlikten $\overline{\Phi_k(x)}$, $\overline{\lambda_k}$ özdeğerine karşılık gelen özfonksiyondur. λ_k kompleks değerli olduğundan $\lambda_k \neq \overline{\lambda_k}$' dır. O halde $\Phi_k(x)$ ve $\overline{\Phi_k(x)}$ farklı özfonksiyonlardır. L de simetrik olduğundan, Teorem 1.2' e göre,

$$\int_{x_1}^{x_2} r(x)\Phi_k(x)\overline{\Phi_k(x)}\,dx = \int_{x_1}^{x_2} r(x)\left\|\Phi_k(x)\right\|^2 dx = 0. \tag{1.9}$$

Öte yandan $r(x)\left\|\Phi_k(x)\right\|^2 > 0$ ’ dır, yani

$$\int_{x_1}^{x_2} r(x)\left\|\Phi_k(x)\right\|^2 dx$$

integrali asla sıfır olamaz. Bu ise (1.9) ile çelişir. O halde kompleks değerli özdeğer varsayımı yanlıştır. Yani simetrik operatörün tüm özdeğerleri reeldir.

Teorem 1.4: Simetrik bir operatörün özdeğerleri

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \cdots < \lambda_n < \cdots$$

şeklinde sonsuz bir dizi oluştururlar ve $n \to \infty$ iken $\lambda_n \to \infty$. Bunun da ötesinde λ_n özdeğerine karşılık gelen n. özfonksiyonun, (x_1, x_2) aralığı üzerinde $n-1$ tane sıfır yeri mevcuttur [4].

1.2.2. Regüler Sturm-Liouville Sistemleri

Özdeğer problemlerinin çoğu ayrılmış sınır koşullarına sahiptir. Bu tür problemler, $L = D\left[p(x)D\right] + q(x)$ olmak üzere,

$$\left.\begin{array}{l} L[y] + \lambda r(x)y = 0,\ x_1 < x < x_2, \\ B_1[y] = a_{11}y(x_1) + a_{12}y'(x_1) = 0, \\ B_2[y] = a_{21}y(x_2) + a_{22}y'(x_2) = 0 \end{array}\right\} \tag{1.10}$$

şeklinde karakterize edilir. Burada $a_{11}{}^2 + a_{12}{}^2 \neq 0,\ a_{21}{}^2 + a_{22}{}^2 \neq 0$ ’ dır. Bu sınıfa ait olan bir özdeğer problemi regüler Sturm-Liouville sistemi olarak adlandırılır.

Ayrılmış homojen sınır değerleri aşağıdaki formlardan birine sahip olabilir:

i) $y(x_1) = 0,\ y(x_2) = 0,$

ii) $y'(x_1) = 0,\ y'(x_2) = 0,$

iii) $hy(x_1) + y'(x_1) = 0,\ hy(x_2) + y'(x_2) = 0$ (h sabit).

Bu formlar sırasıyla I. tip, II. tip, III. tip sınır değerleri olarak adlandırılır. Bu sınır değerlerinden her biri farklı bir fiziksel problem modelinde ortaya çıkar.

Regüler Sturm-Liouville sisteminin L operatörünün simetrik olduğunu göstermek için, (1.10) sisteminde verilen ayrılmış sınır değerlerini sağlayan, ikinci mertebeden sürekli türevlere sahip u ve v fonksiyonları göz önüne alınsın. Bu durumda, $x = x_1$ noktasında:

$$\left.\begin{aligned} a_{11}u(x_1)+a_{12}u'(x_1)=0, \\ a_{11}v(x_1)+a_{12}v'(x_1)=0. \end{aligned}\right\} \quad (1.11)$$

Fakat tanım gereği a_{11} ve a_{12} aynı anda sıfır olamayacağı için (1.11) sisteminin katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Yani,

$$\begin{vmatrix} u(x_1) & u'(x_1) \\ v(x_1) & v'(x_1) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u(x_1) & v(x_1) \\ u'(x_1) & v'(x_1) \end{vmatrix} = W(u,v)(x_1)=0.$$

Benzer şekilde, $x = x_2$ noktasında da $W(u,v)(x_2)=0$ olduğu gösterilebilir. Böylece,

$$p(x)W(u,v)(x_2)-p(x)W(u,v)(x_1)=0-0=0.$$

Buradan da,

$$p(x)W(u,v)(x)\Big|_{x_1}^{x_2}=0.$$

Bu ise Teorem 1.1'e göre L operatörünün simetrik olduğunu gösterir.

Bir regüler Sturm-Liouville sistemi simetrik bir operatöre sahip olduğu için, daha önce ispatlandığı üzere,

i) Farklı özdeğerlere karşılık gelen özfonksiyonlar ortogonaldir.

ii) Operatörün bütün özdeğerleri reeldir.

iii) Özdeğerler

$$\lambda_1<\lambda_2<\lambda_3<\cdots<\lambda_n<\cdots,\ \ \lambda_n\to\infty\ (n\to\infty)$$

şeklinde bir dizi oluşturur. Bunlara ilaveten diğer bir özellik de aşağıdaki teoremle ifade edilir:

Teorem 1.5: Bir regüler Sturm-Liouville sisteminin özdeğerleri basittir, yani bir özdeğer için birden fazla lineer bağımsız özfonksiyon mevcut değildir.

İspat: Teoremin aksi varsayılsın, yani bir λ_n özdeğerine karşılık iki lineer bağımsız $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ özfonksiyonlarının mevcut olduğu kabul edilsin. $x = x_1$ noktasında, her bir özfonksiyon verilen sınır değerlerini sağlamak zorundadır. O halde,

$$\left.\begin{aligned} a_{11}\Phi_n(x)+a_{12}\Phi_n{}'(x)=0, \\ a_{11}\Phi_k(x)+a_{12}\Phi_k{}'(x)=0. \end{aligned}\right\} \quad (1.12)$$

Tanım gereği a_{11} ve a_{12} aynı anda sıfır olamayacağı için (1.12) sisteminin katsayılar determinantı sıfır olmalıdır. Yani,

$$W(\Phi_n, \Phi_k)(x) = 0.$$

Bir diferensiyel denklemin iki çözümünün Wronskian' ı çözüm aralığında bir noktada sıfır değerini alıyorsa, bu aralıkta Wronskian özdeş olarak sıfır olmalıdır. Bu nedenle $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ lineer bağımlıdır, yani $\Phi_n(x)$ ve $\Phi_k(x)$ aynı özfonksiyonu belirler. Bu ise varsayımla çelişir.

1.2.3. Periyodik Sturm-Liouville Sistemleri

Özdeğer problemlerinin önemli bir sınıfı da aşağıdaki formdadır:

$$\left.\begin{aligned} &L[y] + \lambda r(x) y = 0, \ x_1 < x < x_2, \\ &y(x_1) = y(x_2), \ y'(x_1) = y'(x_2). \end{aligned}\right\}$$

Burada $L = D\big[p(x)D\big] + q(x)$ ve $p(x_1) = p(x_2)$' dir. Bu tür problemlere periyodik Sturm-Liouville sistemi denir. Dikkat edilirse sınır değerleri ayrılmamış formdadır. Kolayca gösterilebilir ki bu sınıfa ait problemlerde L operatörü simetriktir.

Aşağıdaki örnekten de görüleceği üzere, periyodik Sturm-Liouville sistemlerinin özdeğerleri basit olmayabilir. Yani bir özdeğer için iki lineer bağımsız özfonksiyon mevcut olabilir.

Örnek 1.1:

$$y'' + \lambda y = 0, \ y = y(\theta), \ \ -\pi < \theta < \pi, \ y(-\pi) = y(\pi), \ y'(-\pi) = y'(\pi)$$

probleminin özdeğerlerini ve bu özdeğerlere karşılık gelen özfonksiyonları bulunuz.

Çözüm: Problemde $p(\theta) = 1$, bu yüzden $p(-\pi) = p(\pi)$ dir.

$\lambda = 0$ için, diferensiyel denklemin genel çözümü $y(\theta) = c_1 + c_2\theta$' dır. Periyodik sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(-\pi) - y(\pi) = -2c_2\pi = 0,$$

$$y'(-\pi) - y'(\pi) = c_2 - c_2 = 0.$$

Böylece $c_2 = 0$, c_1 ise keyfi olarak elde edilir. O halde özdeğer- özfonksiyon çifti aşağıdaki gibidir:

$$\lambda_0 = 0, \ \Phi_0(\theta) = 1.$$

$\lambda = k^2 > 0$ için, denklemin genel çözümü $y(\theta) = c_1 \cos k\theta + c_2 \sin k\theta$' dır. Periyodik sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(-\pi) - y(\pi) = c_1 \cos k\pi - c_2 \sin k\pi - c_1 \cos k\pi + c_2 \sin k\pi = 0,$$

$$y'(-\pi) - y'(\pi) = kc_1 \sin k\pi + kc_2 \cos k\pi + kc_1 \sin k\pi - kc_2 \cos k\pi = 0.$$

Böylece, $c_2 \sin k\pi = 0,\ c_1 \sin k\pi = 0$ bulunur. Buradan da, $k = n,\ n = 1,2,3,...$ için c_1 ve c_2 keyfi olarak elde edilir. Bu ise her bir $\lambda_n = n^2,\ n = 1,2,3,...$ özdeğerine karşılık iki lineer bağımsız özfonksiyonun mevcut olduğunu gösterir:

$$\Phi_n(\theta) = c_1 \cos n\theta + c_2 \sin n\theta,\ n = 1,2,3,... \tag{1.13}$$

ve

$$\Psi_n(\theta) = c_3 \cos n\theta + c_4 \sin n\theta,\ n = 1,2,3,... \tag{1.14}$$

Burada $c_1,\ c_2,\ c_3,\ c_4$ katsayıları $\Phi_n(\theta)$ ve $\Psi_n(\theta)$' yı lineer bağımsız yapan sabitlerdir.

$\lambda = -k^2 < 0$ için denklemin genel çözümü $y(\theta) = c_1 e^{kx} + c_2 e^{-kx}$' dır. Periyodik sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(-\pi) - y(\pi) = c_1 e^{-k\pi} + c_2 e^{k\pi} - c_1 e^{k\pi} - c_2 e^{-k\pi} = 0,$$

$$y'(-\pi) - y'(\pi) = kc_1 e^{-k\pi} - kc_2 e^{k\pi} - kc_1 e^{k\pi} + kc_2 e^{-k\pi} = 0.$$

Böylece, $(c_2 - c_1)(e^{k\pi} - e^{-k\pi}) = 0$ ve $(c_1 - c_2)(e^{-k\pi} - e^{k\pi}) = 0$ bulunur. Buradan da, $c_1 = c_2 = 0$ olarak elde edilir. Yani, $y \equiv 0$' dır. O halde, $\lambda = -k^2 < 0$ özdeğer değildir.

$\lambda = k^2 > 0$ için $c_1 = c_4 = 1,\ c_2 = c_3 = 0$ seçimi ile (1.13) ve (1.14)' ten özfonksiyonların aşağıdaki gibi olduğu görülür:

$$\Phi_n(\theta) = \cos n\theta,\ \ (n = 1,2,3,...)$$

ve

$$\Psi_n(\theta) = \sin n\theta,\ \ (n = 1,2,3,...).$$

Bu durumda $\Phi_n(\theta)$ ve $\Psi_n(\theta)$ sadece lineer bağımsız değil, aynı zamanda $[-\pi, \pi]$ aralığı üzerinde ortogonaldir, çünkü

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos n\theta \sin n\theta\, d\theta = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sin 2n\theta\, d\theta = -\frac{1}{4} \cos 2n\theta \Big|_{-\pi}^{\pi} = 0.$$

Bu örnekte olduğu gibi, birden fazla lineer bağımsız özfonksiyonların mevcut olduğu durumlarda sabitlerin uygun seçimi ile lineer bağımsız özfonksiyonların en basit kombinasyonu elde edilebilir.

Genel olarak, tek bir λ_n özdeğerine karşılık iki lineer bağımsız özfonksiyon $\Phi_n(\theta)$ ve $\Psi_n(\theta)$ bulunmuş ise, daima $\Phi_n(\theta)$ ve $\Psi_n(\theta)$' in öyle bir lineer kombinasyonu bulunabilir ki belirli aralıkta bu özfonksiyonlar ortogonal olur. Son olarak, ikinci mertebeden diferensiyel denklemin tek bir özdeğerine ikiden daha fazla lineer bağımsız özfonksiyon karşılık gelemez.

1.2.4. Singüler Sturm- Liouville Sistemleri

Uygulamalarda rastlanan en ilginç ve yaygın Sturm-Liouville sistemlerinin çoğu, aşağıda tanımlandığı gibi singüler olarak sınıflandırılır. Bu singülerlikler sistemin genel yapısını, özellikle de L operatörünün simetrikliği için gerekli olan sınır değerlerinin formunu değiştirir.

Tanım 1.5: Bir Sturm-Liouville sisteminde, $[x_1, x_2]$ aralığı üzerinde aşağıdaki durumların biri veya daha fazlası varsa, sisteme singülerdir denir:

i) $p(x_1) = 0$ ve (veya) $p(x_2) = 0$' dır.

ii) $p(x), q(x)$ veya $r(x)$, $x = x_1$ ve (veya) $x = x_2$ noktalarında sonsuzdur.

iii) x_1 ve (veya) x_2 sonsuzdur.

Bu sınıfa ait diferensiyel denklemlerin bazıları aşağıdaki gibidir:

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)y'\right] + \lambda y = 0, \quad -1 < x < 1 \quad \text{(Legendre Denklemi)},$$

$$\frac{d}{dx}\left(xy'\right) - \frac{v^2}{x}y + \lambda xy = 0, \quad 0 < x < b \quad \text{(Bessel Denklemi)},$$

$$\frac{d}{dx}\left(xe^{-x}y'\right) + \lambda e^{-x}y = 0, \quad 0 < x < \infty \quad \text{(Laguerre Denklemi)},$$

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-x^2}y'\right) + \lambda e^{-x^2}y = 0, \quad -\infty < x < \infty \quad \text{(Hermite Denklemi)}.$$

Legendre denklemi, $p(x) = 1 - x^2$ fonksiyonu sınır noktaları $x = \pm 1$ de sıfır olduğu için singülerdir. Bessel denklemi, $p(x) = x$ fonksiyonu $x = 0$ noktasında sıfır ve $v \neq 0$ için

$q(x)=-\dfrac{v^2}{x}$ fonksiyonu $x=0$ noktasında sonsuz olduğundan singülerdir. Laguerre denklemi, $p(x)=xe^{-x}$ fonksiyonu $x=0$ noktasında sıfır ve aralığın bir ucu sonsuz olduğu için singülerdir. Ayrıca bu denklemde $p(x)=xe^{-x}\to 0\ (x\to\infty)$' dır. Hermite denkleminin singülerliği ise sınır noktalarının sonsuz olmasından kaynaklanır. Ayrıca $p(x)=e^{-x^2}\to 0\ (|x|\to\infty)$' dır.

Bir singüler Sturm-Liouville sisteminin simetrik bir operatöre sahip olması için Teorem (1.3)' ten aşağıdaki eşitliğin sağlanması gerekirdi:

$$\int_{x_1}^{x_2}\left(uL[v]-vL[u]\right)\,dx=p(x)W(u,v)(x)\Big|_{x_1}^{x_2}=0.$$

Burada u ve v Sturm-Liouville sisteminin sınır değerlerini sağlayan, ikinci mertebeden sürekli türevlere sahip fonksiyonlardır. Örneğin, singülerlik $x=x_1$ noktasında ise, sınır değerleri aşağıdaki gibi alınabilir:

$$\lim_{x\to x_1^+}p(x)W(u,v)(x)=0 \tag{1.15}$$

ve

$$p(x_2)W(u,v)(x_2)=0. \tag{1.16}$$

İkinci olarak, eğer singülerlik $p(x_1)=0$ olmasından kaynaklanıyorsa, sınır değerinin

$$y(x)\ \text{ve}\ y'(x)\ \text{sonlu}\ \left(x\to x_1^+\right) \tag{1.17}$$

alınması durumunda (1.15) doğrudan sağlanır. İkinci uçtaki yani x_2 noktasındaki sınır değerinin aşağıdaki şekilde alınmasıyla da (1.16) sağlanır:

$$a_{21}y(x_2)+a_{22}y'(x_2)=0.$$

Çünkü,

$$\left.\begin{array}{l} a_{21}u(x_2)+a_{22}u'(x_2)=0, \\ a_{21}v(x_2)+a_{22}v'(x_2)=0 \end{array}\right\}$$

olduğundan aşağıdaki eşitlik sağlanır:

$$\begin{aligned} p(x_2)W(u,v)(x_2)&=p(x_2)\left[u(x_2)v'(x_2)-u'(x_2)v(x_2)\right] \\ &=p(x_2)\left[\left(-\frac{a_{22}}{a_{21}}\right)u'(x_2)v'(x_2)-u'(x_2)\left(-\frac{a_{22}}{a_{21}}\right)v'(x_2)\right]=0. \end{aligned}$$

(1.15)’ in sağlanması için (1.17)’ den farklı sınır değerleri de verilebilir, fakat bu durumda problemin sıfırdan farklı çözümünün olmaması sorunuyla karşılaşılır. Bu nedenle, birçok örnekte bu tür sınır değerleri kullanılır. Eğer singülerlik $x = x_2$ noktasında mevcutsa $\left(p\left(x_2\right) = 0\right)$, bu durumda

$$y\left(x\right) \text{ ve } y'\left(x\right) \text{ sonlu } \left(x \to x_2^-\right)$$

alınması aşağıdaki eşitliği sağlar:

$$\lim_{x \to x_2^-} p\left(x\right) W\left(u, v\right)\left(x\right) = 0.$$

Son olarak, $p\left(x_1\right) = p\left(x_2\right) = 0$ ise, sınır değerleri aşağıdaki şekilde alınabilir:

$$y\left(x\right),\ y'\left(x\right) \text{ sonlu } \left(x \to x_1^+ \text{ ve } x \to x_2^-\right).$$

Bazen singüler özdeğer problemi simetrik operatör içermez. Bu duruma örnek, sonsuz boyutta matematiksel olarak modellenen uzun bir çubuğun içindeki sıcaklık dağılımı verilebilir. Bu gibi problemlerde, özdeğer ve özfonksiyonların Teorem 1.2-1.4’ deki şartları sağlaması beklenemez. Aşağıdaki problem göz önüne alınsın:

Örnek 1.2:

$$y'' + \lambda y = 0,\ 0 < x < \infty,\ y\left(0\right) = 0,\ y' \text{ sonludur } \left(x \to \infty\right)$$

probleminin özdeğer ve özfonksiyonlarını bulunuz.

λ=0 için, diferensiyel denklemin genel çözümü $y\left(x\right) = c_1 + c_2 x$’ dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y\left(0\right) = c_1 + c_2 0 = 0,$$

$$\lim_{x \to \infty} y\left(x\right) \text{ sonlu ise } \lim_{x \to \infty} c_1 + c_2 x \text{ sonlu.}$$

Bu durumda, $c_1 = c_2 = 0$ olarak elde edilir. Yani $y \equiv 0$’ dır. O halde, $\lambda = 0$ özdeğer değildir.

$\lambda = k^2 > 0$ için, diferensiyel denklemin genel çözümü $y\left(x\right) = c_1 \cos kx + c_2 \sin kx$’ dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y\left(0\right) = c_1 \cos k0 + c_2 \sin k0 = 0.$$

Böylece, $c_1 = 0$ olarak elde edilir. Yani,

$$y\left(x\right) = c_2 \sin kx \text{ ve } y'\left(x\right) = kc_2 \cos kx \text{ sonludur } \left(x \to \infty\right).$$

O halde, $\lambda = k^2 > 0$ özdeğerdir. İlgili özfonksiyon ise

$$\Phi(x) = \sin kx.$$

$\lambda = -k^2 < 0$ için, denklemin genel çözümü $y(x) = c_1 e^{kx} + c_2 e^{-kx}$' dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(0) = c_1 + c_2 = 0.$$

Buradan $c_2 = -c_1$ olarak bulunur. Yani,

$$y(x) = c_1 e^{kx} - c_1 e^{-kx}.$$

Ayrıca,

$$y(x) \text{ sonlu } (x \to \infty) \text{ ise } c_1 e^{kx} - c_1 e^{-kx} \text{ sonludur.}$$

Böylece $e^{kx} \to \infty$ $(x \to \infty)$ olduğundan $c_1 = 0$ olmalıdır. Yani $y \equiv 0$' dır. O halde, $\lambda = -k^2 < 0$ özdeğer değildir.

Son örnekte verilen problem diskret özdeğerlere sahip değildir, özdeğerler bir aralıktaki bütün reel sayılardır. Bunun nedeni, önceki örneklerden farklı olarak problemi belirleyen operatörün simetrik olmayışıdır. Gerçekten, $p(x) = 1$ olduğundan

$$W(u,v)(x)\Big|_0^\infty = 0.$$

1.3. Yaklaşım Metotları

1.3.1. Homojen Olmayan Denklemler

Bu bölümde yaklaşım yöntemlerinden Collocation ve Galerkin yöntemleri kullanılarak homojen olmayan sınır değer problemlerinin yaklaşık çözümleri incelenecektir. Bu nedenle aşağıdaki sınır değer problemi göz önüne alınsın:

$$L[y] = f(x),\ x_1 < x < x_2,\ B_1[y] = \alpha,\ B_2[y] = \beta. \tag{1.18}$$

Burada L kendine eş bir operatör ve B_1, B_2 ayrılmış sınır operatörleridir. Öncelikle (1.18) probleminin gerçek çözümüne yakınsayan lineer deneme çözümü aşağıdaki şekilde oluşturulsun:

$$\Psi(x) := g_0(x) + \sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x). \tag{1.19}$$

Burada c_j katsayıları bilinmeyen sabitler; $g_0(x)$ homojen olmayan sınır değerlerini sağlayan fonksiyon; $g_j(x), j = 1,2,3,...,N$ fonksiyonları ise homojen sınır değerlerini sağlayan lineer bağımsız fonksiyonlardır. Yani

$$B_1[g_j] = 0,\ B_2[g_j] = 0,\ j = 1,2,3,...,N.$$

$g_0(x)$ ve $g_j(x)$ fonksiyonlarının seçimlerinden dolayı deneme çözümü $\Psi(x)$, bilinmeyen bütün c_j katsayıları için verilen sınır şartlarını sağlar.

NOT: $\alpha = \beta = 0$ ise, $g_0 \equiv 0$ olarak seçilir.

Genel olarak $g_j(x)$ fonksiyonları çözümünün genel formu önceden tahmin edilebilen fiziksel problemlere bağlı olarak belirlenir. Yaklaşım yöntemlerinin doğruluğu seçilen N değerlerinin büyüklüğüne bağlıdır.

c_j sabitlerini belirlemek için hata fonksiyonu olarak adlandırılan aşağıdaki fonksiyon tanımlanır:

$$E_N(x) := L[\Psi] - f(x),\ x_1 < x < x_2.$$

Amaç, $E_N(x)$ fonksiyonunu minimize etmektir. Bu amaçla iki yöntem verilir:

1) Collocation Yöntemi,
2) Galerkin Yöntemi.

1) Collocation Yöntemi: Bu yöntem uygulaması en kolay yöntemdir. Bu yöntem, problemin ait olduğu aralıkta belirlenen N noktada hata fonksiyonunun sıfıra eşitlenmesiyle c_j katsayılarını belirler. N noktanın seçimi fiziksel problemin yapısına bağlı olarak tahmin edilebileceği gibi, eşit dağılım gösterecek şekilde de belirlenir. Collocation yönteminin dezavantajı, seçilen N noktaya bağlı olarak yaklaşık çözümün büyük değişimler gösterebilmesidir. Bu sorun, N yeterince büyük alınarak aşılabilir.

2) Galerkin Yöntemi: B. G. Galerkin tarafından 1915 yılında geliştirilen bu yöntem, en yaygın kullanılan yaklaşım yöntemlerinden biridir. Bu yöntemle, c_j katsayılarının belirlenmesi için gerekli N denklem, hata fonksiyonu ve $g_k(x), k = 1,2,3,...,N$ fonksiyonlarının çarpımının belirlenen aralıktaki integrallerin sıfıra eşitlenmesiyle aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\int_{x_1}^{x_2} E_N(x) g_k(x)\, dx = 0,\ k = 1,2,3,\ldots,N.$$

Örnek 1.3: Galerkin ve Collocation yöntemlerini kullanarak b uzunluğundaki bir kirişin taşıyabileceği maksimum P yükünü hesaplayınız ve hangi yöntemin gerçek çözüme daha yaklaşık çözüm verdiğini belirleyiniz. Problem matematiksel olarak

$$EIy^{(4)} + Py'' = 0,\ 0 < x < b,\ y(0) = y''(0) = 0,\ y(b) = y''(b) = 0$$

şeklinde formüle edilir. Burada EI kirişin 'stiff' sabitidir.

Çözüm: Deneme çözümü $\Psi(x)$ fonksiyonu

$$\Psi''(0) = \Psi''(b) = 0$$

eşitliği sağlanacak şekilde,

$$\Psi''(x) = x(x-b) \tag{1.20}$$

olarak seçilsin. (1.20) eşitliğinden integral alınırsa $\Psi(x)$ aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\Psi(x) = \frac{x^4}{2} - \frac{bx^3}{6} + c_1 x + c_2. \tag{1.21}$$

$\Psi(0) = 0$ ve $\Psi(b) = 0$ sağlanacağından, c_1 ve c_2 şu şekilde bulunur:

$$\Psi(0) = 0 \text{ olduğundan } c_2 = 0.$$

$$\Psi(b) = 0 \text{ olduğundan } c_1 = \frac{b^3}{12}.$$

c_1 ve c_2 sabitlerinin bulunan bu değerleri (1.21) eşitliğinde yerine yazılırsa,

$$\Psi(x) = \frac{x^4}{2} - \frac{bx^3}{6} + \frac{b^3 x}{12}$$

fonksiyonu bütün sınır değerlerini sağlar.

$$\Lambda := \frac{P}{EI} \tag{1.22}$$

olarak tanımlanırsa, hata fonksiyonu aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\begin{aligned} E_1(x) &= \Psi^{(4)} + \Lambda\Psi'' \\ &= 2 + \Lambda x(x-b). \end{aligned}$$

Galerkin yöntemine göre $\int_0^b E_1(x)\, \Psi(x)\, dx = 0$ olmalıdır. Bu eşitlik aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\int_0^b \left(2+\Lambda x\left(x-b\right)\right)\left(\frac{x^4}{12}-\frac{bx^3}{6}+\frac{b^3x}{12}\right)dx=0.$$

Yani,

$$2\int_0^b \left(\frac{x^4}{12}-\frac{bx^3}{6}+\frac{b^3x}{12}\right)dx+\Lambda\int_0^b \left(\frac{x^6}{12}-\frac{bx^5}{6}+\frac{b^3x^3}{12}-\frac{bx^5}{12}-\frac{b^2x^4}{6}+\frac{b^4x^2}{12}\right)dx=0.$$

O halde,

$$\frac{17\Lambda b^7}{168}=b^5,$$

ve buradan da

$$\Lambda=\frac{168}{17b^2}\simeq\frac{9.882}{b^2}$$

olarak elde edilir. Λ’ nın bu değeri (1.22)’ de yerine koyulursa P aşağıdaki şekilde bulunmuş olur:

$$P\simeq\frac{9.882EI}{b^2}. \tag{1.23}$$

Collocation yöntemine göre, $x=\frac{b}{2}$ noktasında $E_1\left(x\right)=0$ alınırsa:

$$E_1\left(\frac{b}{2}\right)=2+\Lambda\frac{b^2}{4}=0$$

olarak elde edilir. Buradan ve (1.22)’ den, P aşağıdaki şekilde bulunur:

$$P=\frac{8EI}{b^2}. \tag{1.24}$$

Gerçek çözüm ise aşağıdaki şekilde bulunur:

$$EIy^{(4)}+Py''=0 \text{ yani } y^{(4)}+\frac{Py''}{EI}=0.$$

O halde,

$$y\left(x\right)=c_1+c_2x+c_3\cos\sqrt{\Lambda}x+c_4\sin\sqrt{\Lambda}x. \tag{1.25}$$

Bu durumda, $y'\left(x\right)$ ve $y''\left(x\right)$ aşağıdaki gibi verilir:

$$y'\left(x\right)=c_2-c_3\sqrt{\Lambda}\sin\sqrt{\Lambda}x+c_4\sqrt{\Lambda}\cos\sqrt{\Lambda}x,$$

$$y''(x) = -c_3\Lambda\cos\sqrt{\Lambda}x - c_4\Lambda\sin\sqrt{\Lambda}x. \qquad (1.26)$$

$y(0)=0$ sınır değerinin sağlanması için, (1.25)' den:

$$c_1 + c_3 = 0 \text{ yani } c_1 = -c_3$$

olarak elde edilir. $y''(0)=0$ sınır değerinin sağlanması için, (1.26)' dan $c_3 = 0$ olarak elde edilir. $y(b)=0$ sınır değerinin sağlanması için, (1.25)' den:

$$c_2 b + c_4 \sin\sqrt{\Lambda}b = 0$$

olarak elde edilir. $y''(b)=0$ sınır değerinin sağlanması için, (1.26)' dan:

$$c_4\Lambda\sin\sqrt{\Lambda}b = 0 \text{ yani } \sqrt{\Lambda}b = n\pi,$$

yani,

$$\Lambda = \frac{n^2\pi^2}{b^2}.$$

Buradan ve (1.22)' den

$$P = \frac{n^2\pi^2 EI}{b^2}$$

olarak bulunur. Böylece $n=1$ için:

$$P \simeq \frac{9.870EI}{b^2}. \qquad (1.27)$$

Görüleceği üzere (1.23) ile verilen, Galerkin yöntemiyle elde edilen maksimum yük P' nin yaklaşık değeri, (1.27) ile verilen gerçek P değerine oldukça yakındır. (1.24) ile verilen Collocation yöntemiyle elde edilen yaklaşık değer ise gerçek çözüme Galerkin yöntemindeki değer kadar yakın değildir.

Sabit bir N değeri için, genellikle Galerkin yöntemi Collocation yönteminden daha doğru sonuç verir. Collocation yönteminin avantajı uygulamadaki kolaylığıdır. Buna rağmen bir veya iki terimli yaklaşımlar için Galerkin yöntemi tercih edilir.

1.3.2. Özdeğer Problemleri

Yukarıdaki verilen yaklaşım yöntemleri Sturm- Liouville sisteminin yaklaşık özdeğer ve özfonksiyonlarını bulmak için de kullanılır. İkinci mertebe kendine eş formdaki

$$L[y]+\lambda r(x)y=0,\ x_1<x<x_2$$

denklemler için hata fonksiyonu

$$E_N(x)=L[\Psi]+\Lambda r(x)\Psi(x) \tag{1.28}$$

olarak tanımlanır. Burada Λ, verilen Sturm- Liouville sisteminin yaklaşık özdeğerleri ve

$$\Psi(x)=\sum_{j=1}^{N}c_j g_j(x)$$

sistemin yaklaşık özfonksiyonudur. Özdeğer problemleri için sınır değerleri homojen olduğundan $g_0(x)=0$ alınacaktır.

Galerkin veya Collocation yöntemlerinin uygulanmasıyla bilinmeyen c_j katsayılarını içeren, N bilinmeyenden oluşan bir homojen denklem sistemi elde edilir. Sıfırdan farklı çözüm elde etmek için bilinmeyenlerin katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir. Böylece Λ’ ya bağlı N. dereceden bir polinom elde edilir. Bu polinomun kökleri, verilen Sturm-Liouville sisteminin ilk N yaklaşık özdeğerini verir.

Örnek 1.4:

$$y''+\lambda y=0,\ y(0)=0,\ y(1)=0$$

özdeğer probleminin $\Psi(x)=c_1x(1-x)+c_2x^2(1-x)$ yaklaşım fonksiyonu için yaklaşık özdeğer ve özfonksiyonlarını hesaplayınız.

Çözüm: Bu durumda, (1.28)’ e göre:

$$\begin{aligned}E_2(x)=\Psi''+\Lambda\Psi &= -2c_1+2c_2-6c_2x+\Lambda\left[c_1\left(x-x^2\right)+c_2\left(x^2-x^3\right)\right]\\ &= c_1\left[-2+\Lambda\left(x-x^2\right)\right]+c_2\left[2-6x+\Lambda\left(x^2-x^3\right)\right].\end{aligned}$$

Galerkin yöntemine göre, $\int_0^1 E_2(x)g_1(x)dx=0$ ve $\int_0^1 E_2(x)g_2(x)dx=0$ olmalıdır.

$$\Psi(x)=c_1x(1-x)+c_2x^2(1-x)$$

olduğundan, $g_1(x)$ ve $g_2(x)$ fonksiyonları aşağıdaki gibi tanımlansın:

$$g_1(x):=x(1-x),\ g_2(x):=x^2(1-x).$$

$\int_0^1 E_2(x)g_1(x)\,dx = 0$ olması durumunda:

$$\int_0^1 \left\{c_1\left[-2+\Lambda\left(x-x^2\right)\right]+c_2\left[2-6x+\Lambda\left(x^2-x^3\right)\right]\right\}\left(x-x^2\right)dx = 0.$$

O halde,

$$\int_0^1 \left\{c_1\left[-2x+2x^2+\Lambda\left(x^2-2x^3+x^4\right)\right]+c_2\left[2x-8x^2+6x^3+\Lambda\left(x^3-2x^4+x^5\right)\right]\right\}dx = 0.$$

Buradan da,

$$c_1\left[-\frac{2x^2}{2}+\frac{2x^3}{3}+\Lambda\left(\frac{x^3}{3}-\frac{2x^4}{4}+\frac{x^5}{5}\right)\right]\Bigg|_0^1$$
$$+c_2\left[\frac{2x^2}{2}-\frac{8x^3}{3}+\frac{6x^4}{4}+\Lambda\left(\frac{x^4}{4}-\frac{2x^5}{5}+\frac{x^6}{6}\right)\right]\Bigg|_0^1 = 0.$$

Yani,

$$c_1\left[-\frac{1}{3}+\frac{\Lambda}{30}\right]+c_2\left[-\frac{1}{6}+\frac{\Lambda}{60}\right]=0. \qquad (1.29)$$

$\int_0^1 E_2(x)g_2(x)\,dx = 0$ olması durumunda:

$$\int_0^1 \left\{c_1\left[-2+\Lambda\left(x-x^2\right)\right]+c_2\left[2-6x+\Lambda\left(x^2-x^3\right)\right]\right\}\left(x^2-x^3\right)dx = 0.$$

O halde,

$$\int_0^1 \left\{c_1\left[-2x^2+2x^3+\Lambda\left(x^3-2x^4+x^5\right)\right]+c_2\left[2x^2-8x^3+6x^4+\Lambda\left(x^4-2x^5+x^6\right)\right]\right\}dx = 0.$$

Buradan da,

$$c_1\left[-\frac{2x^3}{3}+\frac{2x^4}{4}+\Lambda\left(\frac{x^4}{4}-\frac{2x^5}{5}+\frac{x^6}{6}\right)\right]\Bigg|_0^1$$
$$+c_2\left[\frac{2x^3}{3}-\frac{8x^4}{4}+\frac{6x^5}{5}+\Lambda\left(\frac{x^5}{5}-\frac{2x^6}{6}+\frac{x^7}{7}\right)\right]\Bigg|_0^1 = 0.$$

Yani,

$$c_1\left[-\frac{1}{6}+\frac{\Lambda}{60}\right]+c_2\left[-\frac{2}{15}+\frac{\Lambda}{105}\right]=0. \qquad (1.30)$$

c_1 ve c_2 sabitlerinin sıfır olmayan değerlerini elde etmek için (1.29) ve (1.30) göz önünde bulundurarak aşağıdaki şekilde katsayılar determinantı oluşturulur:

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{3}+\frac{\Lambda}{30} & -\frac{1}{6}+\frac{\Lambda}{60} \\ -\frac{1}{6}+\frac{\Lambda}{60} & -\frac{2}{15}+\frac{\Lambda}{105} \end{vmatrix}=0.$$

Bu determinant hesaplanırsa,

$$\frac{2}{45}-\frac{3\Lambda}{315}-\frac{2\Lambda}{450}+\frac{\Lambda^2}{3150}-\frac{1}{36}+\frac{\Lambda}{360}+\frac{\Lambda}{360}-\frac{\Lambda^2}{3600}=0$$

elde edilir. Yani,

$$\Lambda^2-52\Lambda+420=0.$$

Buradan da Λ_1 ve Λ_2 aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\Lambda_1=10 \text{ ve } \Lambda_2=42.$$

Collocation yöntemine göre, $x=\frac{1}{3}$ ve $x=\frac{2}{3}$ noktalarında $E_2(x)=0$ olarak alınırsa:

$$E_2\left(\frac{1}{3}\right)=c_1\left[-2+\Lambda\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{9}\right)\right]+c_2\left[2-\frac{6}{3}+\Lambda\left(\frac{1}{9}-\frac{1}{27}\right)\right]=0.$$

O halde,

$$c_1\left[-2+\frac{2\Lambda}{9}\right]+c_2\left[\frac{2\Lambda}{27}\right]=0. \qquad (1.31)$$

$$E_2\left(\frac{2}{3}\right)=c_1\left[-2+\Lambda\left(\frac{2}{3}-\frac{4}{9}\right)\right]+c_2\left[2-\frac{12}{3}+\Lambda\left(\frac{4}{9}-\frac{8}{27}\right)\right]=0.$$

Yani,

$$c_1\left[-2+\frac{2\Lambda}{9}\right]+c_2\left[-2+\frac{4\Lambda}{27}\right]=0. \qquad (1.32)$$

c_1 ve c_2 sabitlerinin sıfır olmayan değerlerini elde etmek için (1.31) ve (1.32) göz önünde bulundurarak aşağıdaki şekilde katsayılar determinantı oluşturulur:

$$\begin{vmatrix} -2+\dfrac{2\Lambda}{9} & \dfrac{2\Lambda}{27} \\ -2+\dfrac{2\Lambda}{9} & -2+\dfrac{4\Lambda}{27} \end{vmatrix} = 0.$$

Bu determinant hesaplanırsa:

$$4-\frac{8\Lambda}{27}-\frac{4\Lambda}{9}+\frac{8\Lambda^2}{243}+\frac{4\Lambda}{27}-\frac{4\Lambda^2}{243}=0$$

elde edilir. Yani,

$$\Lambda^2-36\Lambda+243=0.$$

Buradan da Λ_1 ve Λ_2 aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\Lambda_1=9 \text{ ve } \Lambda_2=27.$$

Gerçek çözüm ise aşağıdaki şekilde bulunur:

$\lambda=0$ için, denklemin genel çözümü $y(x)=c_1+c_2x$ ’ dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(0)=c_1=0$$

ve

$$y(1)=c_2=0$$

olarak elde edilir. Yani, $y\equiv 0$ ’ dır. O halde, $\lambda=0$ özdeğer değildir.

$\lambda=k^2>0$ için, diferensiyel denklemin genel çözümü $y(x)=c_1\cos kx+c_2\sin kx$ ’ dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(0)=c_1=0$$

ve

$$y(1)=c_2\sin kx=0$$

olarak elde edilir. Yani, $k=n\pi,\ n\in\mathbb{N}$ ’ dir. O halde,

$$\lambda_n=(n\pi)^2,\ n\in\mathbb{N}.$$

Özel olarak

$$\lambda_1=\pi^2\simeq 9,87 \text{ ve } \lambda_2=4\pi^2\simeq 39,48.$$

$\lambda=-k^2<0$ için, genel çözümü $y(x)=c_1e^{kx}+c_2e^{-kx}$ ’ dir. Sınır değerleri uygulanırsa:

$$y(0) = c_1 + c_2 = 0.$$

Buradan $c_2 = -c_1$ bulunur. Yani,

$$y(x) = c_1 e^{kx} - c_1 e^{-kx}.$$

$$y(1) = c_1 e^{k} - c_1 e^{-k} = c_1 \left(e^{k} - e^{-k}\right) = 0.$$

Buradan $c_1 = c_2 = 0$ olarak bulunur. Yani, $y \equiv 0$ ’ dır. O halde $\lambda = -k^2$ özdeğer değildir.

Bulunan bu λ değeri aşağıdaki tablodaki gibi özetlenebilir:

Tablo 1. Örnek 1.4’ ün çözümünde bulunan λ değerleri

λ DEĞERLERİ	COLLOCATION YÖNTEMİ	GALERKIN YÖNTEMİ	GERÇEK ÇÖZÜM
λ_1	9	10	9,87
λ_2	27	42	39,48

Tablodan da görüldüğü üzere, Galerkin yöntemiyle elde edilen λ değerleri gerçek çözümün λ değerlerine daha yakındır.

2. YAPILAN ÇALIŞMALAR, BULGULAR VE İRDELEME

2.1. Sturm-Liouville Problemleri ve Galerkin Yönteminin Uygulanışı

$L = D\left[p(x)D\right] + q(x)$, B_1 ve B_2 ise (1.10) ile verilen ayrılmış sınır koşulları olmak üzere

$$L[y] + \lambda r(x)y = 0;\ B_1[y] = 0,\ B_2[y] = 0 \tag{2.1}$$

özdeğer problemi için Galerkin yönteminin aşağıdaki sistemin çözümüne indirgenir:

Teorem 2.1: (2.1) özdeğer problemi göz önüne alınsın. $c_j,\ j = 1, 2, 3, ..., N$ katsayıları sabitler ;

$$a_{jk} := \int_{x_1}^{x_2} \left\{p(x)g_j'(x)g_k'(x) - q(x)g_j(x)g_k(x)\right\} dx$$

ve

$$b_{jk} := \int_{x_1}^{x_2} r(x)g_j(x)g_k(x)dx$$

olmak üzere (2.1) probleminin ilk N yaklaşık özdeğeri

$$\sum_{j=1}^{N}\left(a_{jk} - \Lambda b_{jk}\right)c_j = 0,\ k = 1, 2, 3, ..., N$$

homojen sisteminde bilinmeyenlerin katsayılar determinantının sıfıra eşitlenmesiyle elde edilen N. derece Λ' ya bağlı polinomun kökleridir.

İspat:

$\Psi(x) = \sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)$ deneme fonksiyonu için, $E_N(x) = L[\Psi] + \Lambda r(x)\Psi(x)$ olduğundan, $E_N(x)$ aşağıdaki şekilde bulunur:

$$E_N(x) = \left\{D\left[p(x)D + q(x)\right]\right\}\left\{\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right\} + \Lambda r(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x).$$

Buradan

$$E_N(x) = D\left[p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x) + q(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right] + \Lambda r(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x). \qquad (2.2)$$

Galerkin yöntemine göre,

$$\int_{x_1}^{x_2} E_N(x) g_k(x)\,dx = 0,\ k = 1, 2, 3, \ldots, N$$

olması gerekir. Son eşitlik ve (2.2) göz önüne alınırsa, aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_2}\left\{D\left[p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right]\right\} g_k(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} q(x)\left\{\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right\} g_k(x)\,dx \\ + \int_{x_1}^{x_2} \Lambda r(x)\left\{\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right\} g_k(x)\,dx = 0.\end{aligned} \qquad (2.3)$$

(2.3) eşitliğinin sol tarafındaki ilk integrale kısmi integrasyon uygulansın:

$$D\left[p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right] dx = dv \Rightarrow p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x) = v,$$

$$g_k(x) = u \Rightarrow g_k'(x)\,dx = du,$$

olarak düşünüldüğünde,

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_2}\left\{D\left[p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right]\right\} g_k(x)\,dx = g_k(x)\left\{p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right\}\Bigg|_{x_1}^{x_2} \\ - \int_{x_1}^{x_2}\left\{p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right\} g_k'(x)\,dx\end{aligned} \qquad (2.4)$$

şeklinde hesaplanır. (2.4)’ teki integral değeri (2.3) eşitliğinde yerine yazılırsa:

$$\begin{aligned}g_k(x)\left\{p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right\}\Bigg|_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2}\left\{p(x)\sum_{j=1}^{N} c_j g_j'(x)\right\} g_k'(x)\,dx \\ + \int_{x_1}^{x_2} q(x)\left\{\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right\} g_k(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} \Lambda r(x)\left\{\sum_{j=1}^{N} c_j g_j(x)\right\} g_k(x)\,dx = 0.\end{aligned} \qquad (2.5)$$

Ayrıca $g_k(x)$ fonksiyonları sınır değerlerini sağladığı için $g_k(x_1) = 0 = g_k(x_2)$ dir. O halde, (2.5) eşitliğinden,

$$\sum_{j=1}^{N} c_j \left\{ \int_{x_1}^{x_2} \left\{ p(x) g_j'(x) g_k'(x) - q(x) g_j(x) g_k(x) \right\} dx \right.$$
$$\left. - \Lambda \int_{x_1}^{x_2} r(x) g_j(x) g_k(x) dx \right\} = 0 \tag{2.6}$$

elde edilir. Eğer,

$$\left.\begin{aligned} a_{jk} &:= \int_{x_1}^{x_2} \left\{ p(x) g_j'(x) g_k'(x) - q(x) g_j(x) g_k(x) \right\} dx, \\ b_{jk} &:= \int_{x_1}^{x_2} r(x) g_j(x) g_k(x) dx \end{aligned}\right\} \tag{2.7}$$

olarak tanımlanırsa (2.6) denklemi

$$\sum_{j=1}^{N} \left(a_{jk} - \Lambda b_{jk} \right) c_j = 0, \ k = 1, 2, 3, ..., N \tag{2.8}$$

sistemine dönüşür.

2.2. Galerkin Yöntemiyle Harmonik Olmayan Salınım Probleminin Çözümü

Bu bölümde kuantum mekanikten kullanılan, aşağıdaki şekilde karakterize edilen harmonik olmayan salınım problemi ele alınacaktır:

$$\frac{\hbar^2}{2m} y'' - \frac{1}{2} m w^2 x^2 y - \varepsilon x^4 y + \lambda y = 0, \ \lim_{x \to -\infty} y(x) = 0, \ \lim_{x \to +\infty} y(x) = 0 \tag{2.9}$$

Burada $\hbar$, m, w, ε sabitlerdir. Λ_0 sıfır-nokta enerjisini, Λ_n $(n \geq 1)$ özdeğerleri ise sistemin mümkün olan enerji seviyelerini göstermektedir.

$$p(x) = \frac{\hbar^2}{2m}, \ q(x) = -\left\{ \frac{m w^2 x^2}{2} + \varepsilon x^4 \right\}, \ r(x) = 1 \tag{2.10}$$

olmak üzere, $L := D\left[p(x) D\right] + q(x)$ olarak tanımlanırsa (2.9) denklemi $L[y] + \lambda r(x) y = 0$ şekline dönüşür. $p(x) > 0, \ r(x) > 0$ ve $p'(x), \ r(x), \ q(x)$ fonksiyonları sürekli olduğundan verilen denklem kendine eştir.

Galerkin yöntemini kullanarak problemi çözmek için sınır değerlerini sağlayan lineer bağımsız $g_j(x)$ fonksiyonları,

$$g_j(x) := x^{j-1}e^{-Kx^2},\ j = 1,2,3,...,N,\ K := \frac{mw}{2\hbar}$$

olarak seçilsin. Aşağıdaki hesaplamalarda $\Lambda_k^{(n)}$ $(k = 1,2,3,...,N)$ n. adımda elde edilen yaklaşık özdeğeri göstermektedir.

2.2.1. N=1 Durumu

$$g_1(x) := e^{-Kx^2} \tag{2.11}$$

olmak üzere, (2.8) sisteminden aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$(a_{11} - \Lambda b_{11})c_1 = 0.$$

O halde,

$$\Lambda = \frac{a_{11}}{b_{11}}.$$

Görüldüğü üzere ilk yaklaşık özdeğeri bulmak için a_{11} ve b_{11} terimlerinin hesaplanması gerekir. (2.7)' den,

$$a_{11} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ p(x)g_1'(x)g_1'(x) - q(x)g_1(x)g_1(x) \right\} dx.$$

$p(x)$ ve $q(x)$ in (2.10) ile verilen değerleri, $g_1(x)$ fonksiyonunun (2.11) ile verilen değeri son integralde yerine yazılırsa:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(e^{-Kx^2}\right)' + \left(\frac{mw^2x^2}{2} + \varepsilon x^4\right)e^{-Kx^2}e^{-Kx^2} \right\} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)^2 + \frac{mw^2x^2e^{-2Kx^2}}{2} + \varepsilon x^4 e^{-2Kx^2} \right\} dx \\
&= mw^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2Kx^2} dx + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-2Kx^2} dx \\
&= mw^2 \frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}} + \varepsilon \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}} \\
&= \frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}}w^{-\frac{1}{2}}} + \frac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}
\end{aligned}$$

olarak hesaplanır. Benzer şekilde (2.7)' den,

$$b_{11}=\int_{-\infty}^{+\infty} r(x)g_1(x)g_1(x)dx.$$

r(x) fonksiyonunun (2.10) ile verilen değeri ve $g_1(x)$ fonksiyonunun (2.11) ile verilen değeri son integralde yerine yazılırsa:

$$b_{11}=\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Kx^2}e^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2Kx^2}dx=\frac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}.$$

Sonuç olarak, ilk yaklaşık özdeğer $\Lambda_1^{(1)}$ aşağıdaki şekilde verilir:

$$\Lambda_1^{(1)}=\frac{a_{11}}{b_{11}}=\frac{\dfrac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}}w^{-\frac{1}{2}}}+\dfrac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}}{\dfrac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}}.$$

Gerekli sadeleştirmeler yapılırsa $\Lambda_1^{(1)}$ aşağıdaki şekilde bulunur:

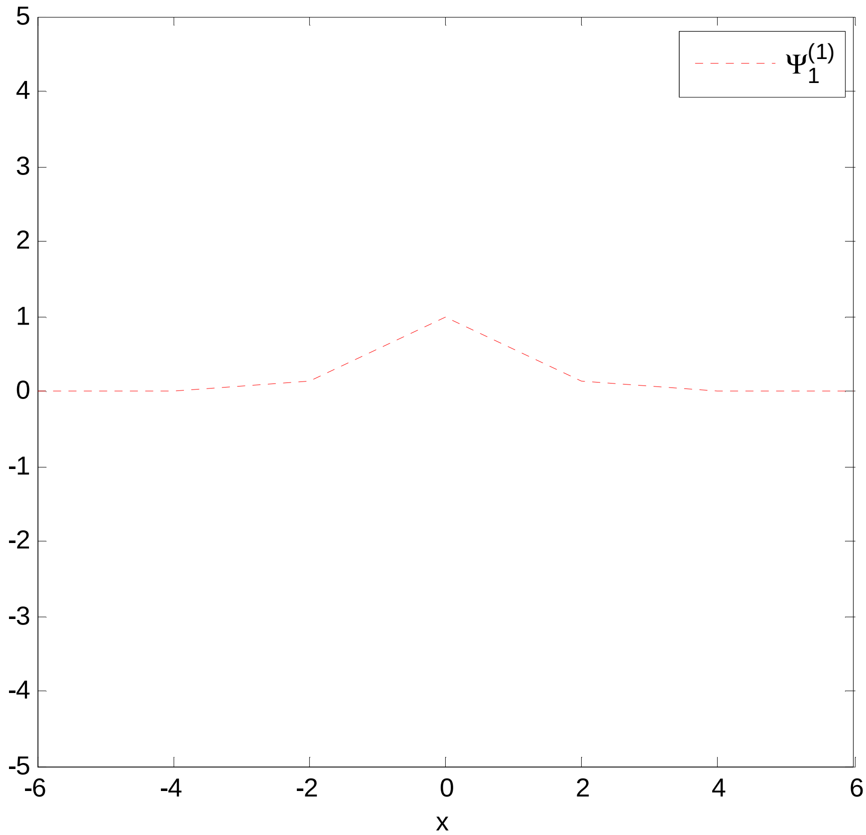
$$\Lambda_1^{(1)}=\frac{\hbar w}{2}+\frac{3\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}. \tag{2.12}$$

$\Lambda_1^{(1)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_1^{(1)}(x)$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_1^{(1)}(x)=c_1g_1(x)=c_1e^{-Kx^2}$$

olarak elde edilir.

Elde edilen yaklaşık özfonksiyonun grafiği aşağıda gösterilmiştir:



Şekil 1. N=1 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonun grafiği

2.2.2. N=2 Durumu

$$g_1(x) := e^{-Kx^2},\ g_2(x) := xe^{-Kx^2} \tag{2.13}$$

olmak üzere, (2.8) sisteminden aşağıdaki sistem elde edilir:

$$\left.\begin{aligned}(a_{11}-\Lambda b_{11})c_1 + (a_{21}-\Lambda b_{21})c_2 &= 0,\\ (a_{12}-\Lambda b_{12})c_1 + (a_{22}-\Lambda b_{22})c_2 &= 0.\end{aligned}\right\} \tag{2.14}$$

(2.14) sisteminden sıfırdan farklı çözümün elde edilmesi için katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir:

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\Lambda b_{11} & a_{21}-\Lambda b_{21} \\ a_{12}-\Lambda b_{12} & a_{22}-\Lambda b_{22} \end{vmatrix} = 0.$$

Buradan da, son determinant hesaplanırsa, aşağıdaki eşitlik bulunur:

$$(a_{11}-\Lambda b_{11})(a_{22}-\Lambda b_{22}) - (a_{12}-\Lambda b_{12})(a_{21}-\Lambda b_{21}) = 0. \tag{2.15}$$

Ayrıca (2.8) sistemindeki (2.7) ile verilen a_{jk} ve b_{jk} katsayıları kendi aralarında simetriktir. Yani $a_{jk}=a_{kj}$ ve $b_{jk}=b_{kj}$ sağlanır. O halde (2.15) eşitliği aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)-\left(a_{12}-\Lambda b_{12}\right)^2=0. \tag{2.16}$$

Yaklaşık özdeğerleri bulmak için gerekli olan a_{12}, a_{22}, b_{12} ve b_{22} katsayıları, p(x), q(x), r(x) fonksiyonlarının (2.10) ile verilen değerleri ve $g_j(x)$ $(j=1,2)$ fonksiyonlarının (2.13) ile verilen değerleri kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

(2.7)' den,

$$a_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_1'(x)g_2'(x)-q(x)g_1(x)g_2(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$\begin{aligned}
a_{12}&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(xe^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)e^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}\right\}dx\\
&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)\left(e^{-Kx^2}-2Kx^2e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^3e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^5e^{-2Kx^2}\right\}dx\\
&=-\frac{\hbar w}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^5e^{-2Kx^2}dx=0.
\end{aligned}$$

Benzer şekilde (2.7)' den,

$$b_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_1(x)g_2(x)dx.$$

O halde,

$$b_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-2Kx^2}dx=0.$$

(2.7)' den,

$$a_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_2'(x)g_2'(x)-q(x)g_2(x)g_2(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(xe^{-Kx^2}\right)'\left(xe^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)xe^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}\right\}dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}-2Kxe^{-Kx^2}\right)^2+\frac{mw^2x^4e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^6e^{-2Kx^2}\right\}dx$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2Kx^2}dx-\hbar w\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}-\hbar w\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+mw^2\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+\varepsilon\frac{15\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}$$

$$=\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}+\frac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}.$$

Benzer şekilde (2.7)’ den,

$$b_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_2(x)g_2(x)dx.$$

O halde,

$$b_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx=\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}.$$

$a_{12}=0=b_{12}$ olarak bulunduğundan, (2.16) eşitliği

$$(a_{11}-\Lambda b_{11})(a_{22}-\Lambda b_{22})=0$$

şeklinde yazılabilir. Buradan da,

$$(a_{11}-\Lambda b_{11})=0 \text{ ve } (a_{22}-\Lambda b_{22})=0.$$

$$(a_{11}-\Lambda b_{11})=0\Rightarrow\Lambda_1^{(2)}=\frac{a_{11}}{b_{11}}=\frac{\hbar w}{2}+\frac{3\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}. \tag{2.17}$$

Bu yaklaşık özdeğer, N=1 durumunda bulunan, (2.12) ile verilen yaklaşık özdeğerdir.

$$(a_{22}-\Lambda b_{22})=0\Rightarrow\Lambda_2^{(2)}=\frac{a_{22}}{b_{22}}=\frac{\dfrac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}+\dfrac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}}{\dfrac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}}.$$

Gerekli sadeleştirmeler yapılırsa $\Lambda_2^{(2)}$ aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\Lambda_2^{(2)} = \frac{3\hbar w}{2} + \frac{15\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}. \tag{2.18}$$

$\Lambda_1^{(2)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_1^{(2)}(x)$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_1^{(2)}(x) = c_1 g_1(x) = c_1 e^{-Kx^2}$$

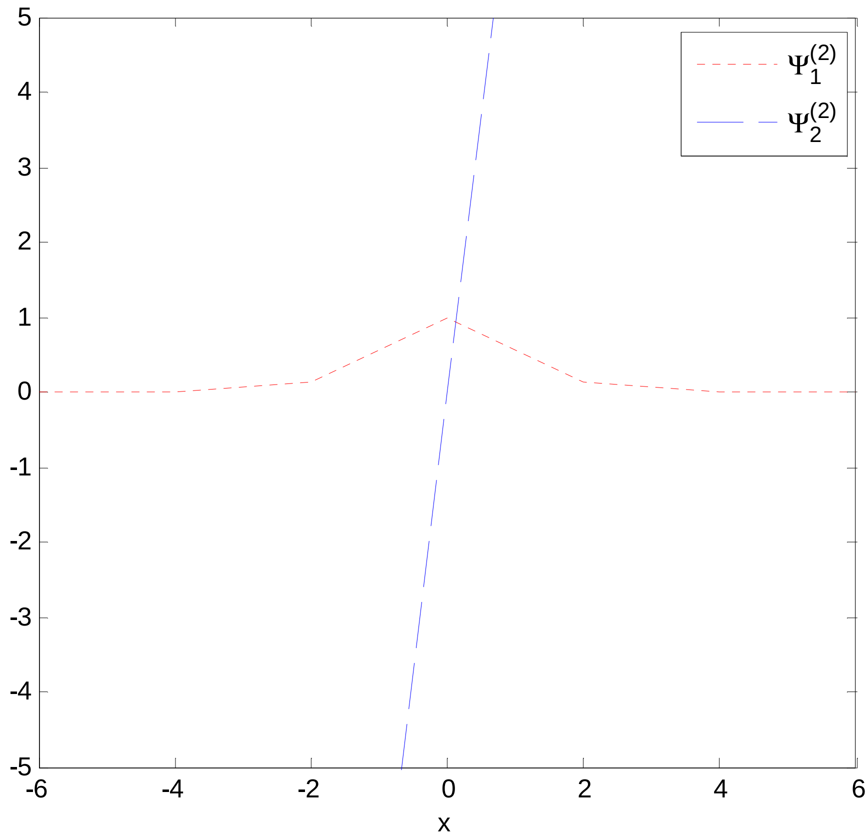
olarak elde edilir.

$\Lambda_2^{(2)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_2^{(2)}(x)$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_2^{(2)}(x) = c_2 g_2(x) = c_2 x e^{-Kx^2}$$

olarak elde edilir.

N=2 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri aşağıda gösterilmiştir:



Şekil 2. N=2 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri

2.2.3. N=3 Durumu

$$g_1(x) := e^{-Kx^2},\ g_2(x) := xe^{-Kx^2},\ g_3(x) := x^2e^{-Kx^2} \qquad (2.19)$$

olmak üzere, (2.8) sisteminden aşağıdaki sistem elde edilir:

$$\left.\begin{aligned}(a_{11}-\Lambda b_{11})c_1+(a_{21}-\Lambda b_{21})c_2+(a_{31}-\Lambda b_{31})c_3 &= 0,\\(a_{12}-\Lambda b_{12})c_1+(a_{22}-\Lambda b_{22})c_2+(a_{32}-\Lambda b_{32})c_3 &= 0,\\(a_{13}-\Lambda b_{13})c_1+(a_{23}-\Lambda b_{23})c_2+(a_{33}-\Lambda b_{33})c_3 &= 0.\end{aligned}\right\} \qquad (2.20)$$

(2.20) sisteminden sıfırdan farklı çözümün elde edilmesi için katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir:

$$\begin{vmatrix}a_{11}-\Lambda b_{11} & a_{21}-\Lambda b_{21} & a_{31}-\Lambda b_{31}\\a_{12}-\Lambda b_{12} & a_{22}-\Lambda b_{22} & a_{32}-\Lambda b_{32}\\a_{13}-\Lambda b_{13} & a_{23}-\Lambda b_{23} & a_{33}-\Lambda b_{33}\end{vmatrix}=0.$$

Buradan da, son determinant hesaplanırsa, aşağıdaki eşitlik bulunur:

$$\begin{aligned}(a_{11}-\Lambda b_{11})\left\{(a_{22}-\Lambda b_{22})(a_{33}-\Lambda b_{33})-(a_{23}-\Lambda b_{23})(a_{32}-\Lambda b_{32})\right\}\\-(a_{13}-\Lambda b_{13})(a_{31}-\Lambda b_{31})(a_{22}-\Lambda b_{22})=0.\end{aligned} \qquad (2.21)$$

Daha önce de belirtildiği üzere $a_{jk}=a_{kj}$ ve $b_{jk}=b_{kj}$ sağlanır. O halde (2.21) eşitliği aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned}(a_{11}-\Lambda b_{11})\left\{(a_{22}-\Lambda b_{22})(a_{33}-\Lambda b_{33})-(a_{23}-\Lambda b_{23})^2\right\}\\-(a_{13}-\Lambda b_{13})^2(a_{22}-\Lambda b_{22})=0.\end{aligned} \qquad (2.22)$$

Yaklaşık özdeğerleri bulmak için gerekli olan a_{13}, a_{23}, a_{33}, b_{13}, b_{23} ve b_{33} katsayıları, p(x), q(x), r(x) fonksiyonlarının (2.10) ile verilen değerleri ve $g_j(x)$ $(j=1,2,3)$ fonksiyonlarının (2.19) ile verilen değerleri kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:
(2.7)' den,

$$a_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_1'(x)g_3'(x)-q(x)g_1(x)g_3(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)e^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}\right\}dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)\left(2xe^{-Kx^2}-2Kx^3e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^4e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^6e^{-2Kx^2}\right\}dx$$
$$=-\hbar w\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx$$
$$=-\hbar w\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+mw^2\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+\varepsilon\frac{15\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}$$
$$=\frac{\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}+\frac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}.$$

Benzer şekilde (2.7)' den,

$$b_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_1(x)g_3(x)dx.$$

O halde,

$$b_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx=\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}.$$

(2.7)' den,

$$a_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_2{}'(x)g_3{}'(x)-q(x)g_2(x)g_3(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(xe^{-Kx^2}\right)'\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)xe^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}\right\}dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}-2Kx^2e^{-Kx^2}\right)\left(2xe^{-Kx^2}-2Kx^3e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^5e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^7e^{-2Kx^2}\right\}dx$$
$$=\frac{\hbar^2}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-2Kx^2}dx-\frac{3\hbar w}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^5e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^7e^{-2Kx^2}dx=0.$$

Benzer şekilde (2.7)' den,

$$b_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_2(x)g_3(x)dx.$$

O halde,

$$b_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty} x^3e^{-2Kx^2}dx=0.$$

(2.7)' den,

$$a_{33}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_3'(x)g_3'(x)-q(x)g_3(x)g_3(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$\begin{aligned}
a_{33}&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)x^2e^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}\right\}dx\\
&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(2xe^{-Kx^2}-2Kx^3e^{-Kx^2}\right)^2+\frac{mw^2x^6e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^8e^{-2Kx^2}\right\}dx\\
&=\frac{2\hbar^2}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx-2\hbar w\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^8e^{-2Kx^2}dx\\
&=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}-2\hbar w\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+mw^2\frac{15\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}+\varepsilon\frac{105\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}}w^{\frac{9}{2}}}\\
&=\frac{11\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+\frac{105\varepsilon\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}}w^{\frac{9}{2}}}.
\end{aligned}$$

Benzer şekilde (2.7)' den,

$$b_{33}=\int_{-\infty}^{+\infty} r(x)g_3(x)g_3(x)dx.$$

O halde,

$$b_{33}=\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty} x^4e^{-2Kx^2}dx=\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}.$$

$a_{23}=0=b_{23}$ olarak bulunduğundan, (2.22) eşitliği

$$\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)\left\{\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)-\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)^2\right\}=0$$

şeklinde yazılabilir. Buradan da,

$$\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)=0 \text{ ve } \left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)-\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)^2=0.$$

$$a_{22}-\Lambda b_{22}=0\Rightarrow \Lambda_2^{(3)}=\frac{3\hbar w}{2}+\frac{15\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}.$$

Bu yaklaşık özdeğer, N=2 durumunda bulunan, (2.18) ile verilen yaklaşık özdeğerdir.

$$\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)-\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)^2=0$$

durumunda katsayıların değerleri yerine yazılırsa:

$$\left(\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}}w^{-\frac{1}{2}}}+\frac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}-\frac{\Lambda\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}\right)\left(\frac{11\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+\frac{105\varepsilon\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}}w^{\frac{9}{2}}}-\frac{3\Lambda\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}\right)$$
$$-\left(\frac{\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}+\frac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}-\frac{\Lambda\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}\right)^2=0,$$

ve buradan da, Λ ’ ın ikinci derece polinomu

$$\Lambda^2\left(\frac{\hbar^3}{2m^3w^3}\right)+\Lambda\left(-\frac{3\hbar^4}{2m^3w^2}-\frac{21\varepsilon\hbar^5}{4m^5w^5}\right)+\frac{5\hbar^5}{8m^3w}+\frac{27\varepsilon\hbar^6}{8m^5w^4}+\frac{45\varepsilon^2\hbar^7}{32m^7w^7}=0$$

elde edilir. Gerekli düzenlemeler yapılırsa:

$$\Lambda^2+\Lambda\left(-3\hbar w-\frac{21\varepsilon\hbar^2}{2m^2w^2}\right)+\frac{5\hbar^2w^2}{4}+\frac{27\varepsilon\hbar^3}{4m^2w}+\frac{45\varepsilon^2\hbar^4}{16m^4w^4}=0$$

bulunur. Son polinomdan aşağıdaki yaklaşık özdeğerler elde edilir:

$$\Lambda_1^{(3)}=\frac{3\hbar w}{2}+\frac{21\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}-\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{36\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{99\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}$$

ve

$$\Lambda_3^{(3)}=\frac{3\hbar w}{2}+\frac{21\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}+\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{36\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{99\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}.$$

Dikkat edilirse, $\Lambda_1^{(3)}$, $\Lambda_1^{(1)}$ ’ in geliştirilmiş yaklaşık özdeğeridir.

Bulunan yaklaşık özdeğerler $\Lambda_1^{(3)}$, $\Lambda_2^{(3)}$ ve $\Lambda_3^{(3)}$ için yaklaşık özfonksiyonlar aşağıdaki gibi hesaplanır:

$a_{12}=a_{21}=0=b_{12}=b_{21}$ ve $a_{23}=a_{32}=0=b_{23}=b_{32}$ olduğundan (2.20) sistemi,

$$\left.\begin{aligned}&\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)c_1+\left(a_{31}-\Lambda b_{31}\right)c_3=0,\\&\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)c_2=0,\\&\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)c_1+\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)c_3=0\end{aligned}\right\}\qquad(2.23)$$

sistemine dönüşür. $\Lambda = \Lambda_1^{(3)}$ ve $\Lambda = \Lambda_3^{(3)}$ için (2.23) sisteminin ikinci eşitliği $c_2 = 0$ olduğunda sağlanır. Bu durumda,

$$\left.\begin{aligned}&(a_{11} - \Lambda b_{11})c_1 + (a_{31} - \Lambda b_{31})c_3 = 0,\\ &(a_{13} - \Lambda b_{13})c_1 + (a_{33} - \Lambda b_{33})c_3 = 0\end{aligned}\right\} \tag{2.24}$$

elde edilir. Önceden hesaplanan a_{jk} ve b_{jk} $(j, k = 1,\ 3)$ katsayılarının değerleri (2.24) sisteminde yerine yazılsın:

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{\hbar w}{2} + \frac{3\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2} - \Lambda\right)c_1 + \left(\frac{\hbar^2}{4m} + \frac{15\varepsilon\hbar^3}{8m^3w^3} - \frac{\Lambda\hbar}{2mw}\right)c_3 = 0,\\ &\left(\frac{\hbar w}{2} + \frac{15\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2} - \Lambda\right)c_1 + \left(\frac{11\hbar^2}{4m} + \frac{105\varepsilon\hbar^3}{8m^3w^3} - \frac{3\Lambda\hbar}{2mw}\right)c_3 = 0.\end{aligned}\right\} \tag{2.25}$$

$A := \frac{\hbar w}{2} - \Lambda,\ B := \frac{\hbar}{2mw}$ olarak tanımlanırsa, (2.25) ile verilen sistem,

$$\left.\begin{aligned}&(A + 3\varepsilon B^2)c_1 + (AB + 15\varepsilon B^3)c_3 = 0,\\ &(A + 15\varepsilon B^2)c_1 + \left(3AB + 105\varepsilon B^3 + \frac{2\hbar^2}{m}\right)c_3 = 0\end{aligned}\right\} \tag{2.26}$$

sistemine dönüşür. (2.26) sisteminin ilk eşitliğinden, son eşitliği çıkarılırsa:

$$-12\varepsilon B^2 c_1 - \left(2AB + \frac{2\hbar^2}{m} + 90\varepsilon B^3\right)c_3 = 0$$

elde edilir. Buradan da,

$$c_1 = -\left(\frac{A}{6\varepsilon B} + \frac{\hbar^2}{6m\varepsilon B^2} + \frac{15B}{2}\right)c_3.$$

Yani

$$c_1 = -\left(\frac{5mw^2}{6\varepsilon} - \frac{mw\Lambda}{3\varepsilon\hbar} + \frac{15\hbar}{4mw}\right)c_3.$$

O halde, $\Lambda_1^{(3)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_1^{(3)}$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_1^{(3)} = c_1 g_1(x) + c_3 g_3(x) = -\left(\frac{5mw^2}{6\varepsilon} - \frac{mw\Lambda_1^{(3)}}{3\varepsilon\hbar} + \frac{15\hbar}{4mw}\right)c_3 e^{-Kx^2} + c_3 x^2 e^{-Kx^2}.$$

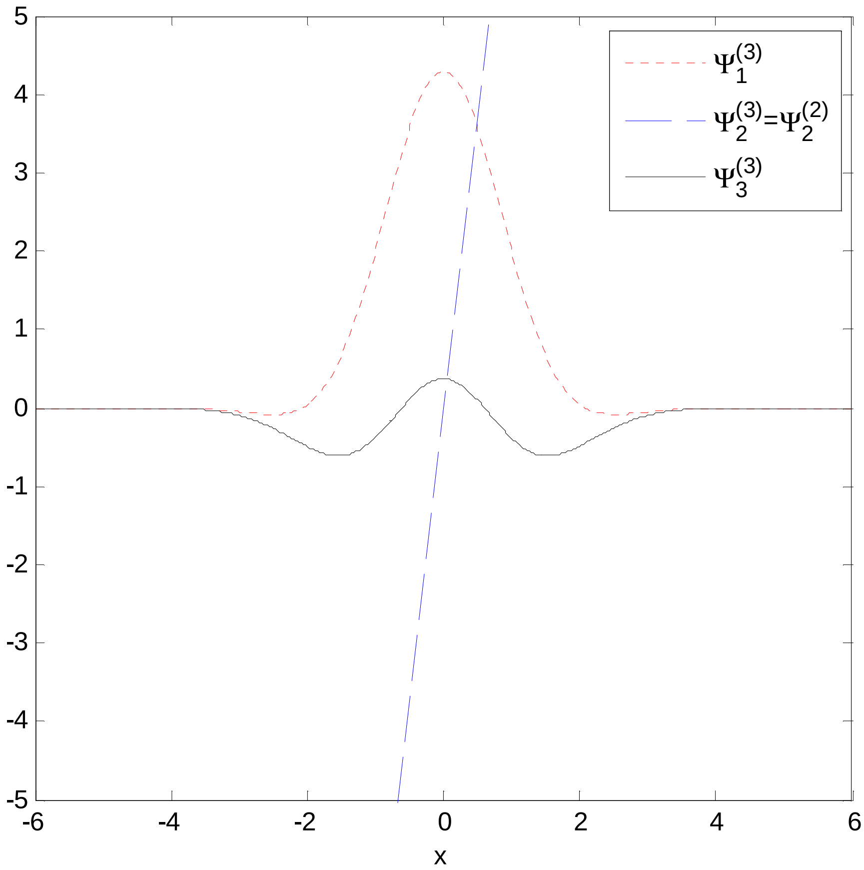
$\Lambda_2^{(3)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_2^{(3)}(x)$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_2^{(3)}(x) = c_2 g_2(x) = c_2 x e^{-Kx^2}.$$

$\Lambda_3^{(3)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_3^{(3)}(x)$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_3^{(3)} = c_1 g_1(x) + c_3 g_3(x) = -\left(\frac{5mw^2}{6\varepsilon} - \frac{mw\Lambda_3^{(3)}}{3\varepsilon\hbar} + \frac{15\hbar}{4mw}\right) c_3 e^{-Kx^2} + c_3 x^2 e^{-Kx^2}.$$

N=3 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri aşağıda gösterilmiştir:



Şekil 3. N=3 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri

2.2.4. N=4 Durumu

$$g_1(x) := e^{-Kx^2},\ g_2(x) := xe^{-Kx^2},\ g_3(x) := x^2 e^{-Kx^2},\ g_4(x) := x^3 e^{-Kx^2} \qquad (2.27)$$

olmak üzere, (2.8) sisteminden aşağıdaki sistem elde edilir:

$$\left.\begin{aligned}
&\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)c_1+\left(a_{21}-\Lambda b_{21}\right)c_2+\left(a_{31}-\Lambda b_{31}\right)c_3+\left(a_{41}-\Lambda b_{41}\right)c_4=0,\\
&\left(a_{12}-\Lambda b_{12}\right)c_1+\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)c_2+\left(a_{32}-\Lambda b_{32}\right)c_3+\left(a_{42}-\Lambda b_{42}\right)c_4=0,\\
&\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)c_1+\left(a_{23}-\Lambda b_{23}\right)c_2+\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)c_3+\left(a_{43}-\Lambda b_{43}\right)c_4=0,\\
&\left(a_{14}-\Lambda b_{14}\right)c_1+\left(a_{24}-\Lambda b_{24}\right)c_2+\left(a_{34}-\Lambda b_{34}\right)c_3+\left(a_{44}-\Lambda b_{44}\right)c_4=0.
\end{aligned}\right\} \tag{2.28}$$

j ve k indislerine bağlı olarak a_{jk} ve b_{jk} katsayılarının bazı değerlerinin sıfır olduğu önceki hesaplamalardan anlaşılmıştır. Genel olarak, eğer j+k tek ise a_{jk} ve b_{jk} sıfırdır. Bu durumda (2.28) sistemi aşağıdaki sisteme dönüşür:

$$\left.\begin{aligned}
&\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)c_1+\left(a_{31}-\Lambda b_{31}\right)c_3=0,\\
&\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)c_2+\left(a_{42}-\Lambda b_{42}\right)c_4=0,\\
&\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)c_1+\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)c_3=0,\\
&\left(a_{24}-\Lambda b_{24}\right)c_2+\left(a_{44}-\Lambda b_{44}\right)c_4=0.
\end{aligned}\right\} \tag{2.29}$$

(2.29) sisteminden sıfırdan farklı çözümün elde edilmesi için katsayılar determinantı sıfıra eşitlenir:

$$\begin{vmatrix}
a_{11}-\Lambda b_{11} & 0 & a_{31}-\Lambda b_{31} & 0\\
0 & a_{22}-\Lambda b_{22} & 0 & a_{42}-\Lambda b_{42}\\
a_{13}-\Lambda b_{13} & 0 & a_{33}-\Lambda b_{33} & 0\\
0 & a_{24}-\Lambda b_{24} & 0 & a_{44}-\Lambda b_{44}
\end{vmatrix}=0.$$

Buradan da, son determinant hesaplanırsa, aşağıdaki eşitlik bulunur:

$$\begin{aligned}
&\left\{\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)-\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)^2\right\}\\
&\qquad\qquad\left\{\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)\left(a_{44}-\Lambda b_{44}\right)-\left(a_{24}-\Lambda b_{24}\right)^2\right\}=0.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Yaklaşık özdeğerleri bulmak için gerekli olan a_{24}, b_{24}, a_{44} ve b_{44} katsayıları, p(x), q(x), r(x) fonksiyonlarının (2.10) ile verilen değerleri ve $g_j(x)$ $(j=1,2,3,4)$ fonksiyonlarının (2.27) ile verilen değerleri kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

(2.7)’ den,

$$a_{24}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_2'(x)g_4'(x)-q(x)g_2(x)g_4(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{24} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(xe^{-Kx^2} \right)' \left(x^3 e^{-Kx^2} \right)' + \left(\frac{mw^2x^2}{2} + \varepsilon x^4 \right) xe^{-Kx^2} x^3 e^{-Kx^2} \right\} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(e^{-Kx^2} - 2Kx^2 e^{-Kx^2} \right) \left(3x^2 e^{-Kx^2} - 2Kx^4 e^{-Kx^2} \right) + \frac{mw^2 x^6 e^{-2Kx^2}}{2} + \varepsilon x^8 e^{-2Kx^2} \right\} dx$$

$$= \frac{3\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2Kx^2} dx - 2\hbar w \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-2Kx^2} dx + mw \int_{-\infty}^{+\infty} x^6 e^{-2Kx^2} dx + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} x^8 e^{-2Kx^2} dx$$

$$= \frac{3\hbar^2}{2m} \frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} - 2\hbar w \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} + mw \frac{15\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}} w^{\frac{7}{2}}} + \varepsilon \frac{105\hbar^{\frac{9}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}} w^{\frac{9}{2}}}$$

$$= \frac{9\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{3}{2}}} + \frac{105\varepsilon\hbar^{\frac{9}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}} w^{\frac{9}{2}}}.$$

Benzer şekilde (2.7)’ den,

$$b_{24} = \int_{-\infty}^{+\infty} r(x) g_2(x) g_4(x) dx.$$

O halde,

$$b_{24} = \int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-Kx^2} x^3 e^{-Kx^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-2Kx^2} dx = \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}}.$$

(2.7)’ den,

$$a_{44} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ p(x) g_4'(x) g_4'(x) - q(x) g_4(x) g_4(x) \right\} dx.$$

O halde,

$$a_{44}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(x^3e^{-Kx^2}\right)'\left(x^3e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^4\right)x^3e^{-Kx^2}x^3e^{-Kx^2}\right\}dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(3x^2e^{-Kx^2}-2Kx^4e^{-Kx^2}\right)^2+\frac{mw^2x^8e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^{10}e^{-2Kx^2}\right\}dx$$
$$=\frac{9\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx-3\hbar w\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^8e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^{10}e^{-2Kx^2}dx$$
$$=\frac{9\hbar^2}{2m}\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}-3\hbar w\frac{15\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}+mw^2\frac{105\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}}w^{\frac{9}{2}}}+\varepsilon\frac{945\hbar^{\frac{11}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{32m^{\frac{11}{2}}w^{\frac{11}{2}}}$$
$$=\frac{69\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+\frac{945\varepsilon\hbar^{\frac{11}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{32m^{\frac{11}{2}}w^{\frac{11}{2}}}.$$

Benzer şekilde (2.7)’ den,

$$b_{44}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_4(x)g_4(x)dx.$$

O halde,

$$b_{44}=\int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-Kx^2}x^3e^{-Kx^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx=\frac{15\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}.$$

(2.30) eşitliğinden,

$$\left(a_{11}-\Lambda b_{11}\right)\left(a_{33}-\Lambda b_{33}\right)-\left(a_{13}-\Lambda b_{13}\right)^2=0 \tag{2.31}$$

ve

$$\left(a_{22}-\Lambda b_{22}\right)\left(a_{44}-\Lambda b_{44}\right)-\left(a_{24}-\Lambda b_{24}\right)^2=0. \tag{2.32}$$

Bu durumda, (2.31) polinomundan, aşağıdaki yaklaşık özdeğerler elde edilir:

$$\Lambda_1^{(4)}=\frac{3\hbar w}{2}+\frac{21\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}-\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{36\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{99\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}$$

ve

$$\Lambda_3^{(4)}=\frac{3\hbar w}{2}+\frac{21\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}+\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{36\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{99\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}.$$

Bu özdeğerler N=3 durumunda bulunan yaklaşık özdeğerlerdir. O halde:

$\Lambda_1^{(4)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_1^{(4)}$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_1^{(4)}=-\left(\frac{5mw^2}{6\varepsilon}-\frac{mw\Lambda_1^{(4)}}{3\varepsilon\hbar}+\frac{15\hbar}{4mw}\right)c_3e^{-Kx^2}+c_3x^2e^{-Kx^2}.$$

$\Lambda_3^{(4)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_3^{(4)}$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_3^{(4)}=-\left(\frac{5mw^2}{6\varepsilon}-\frac{mw\Lambda_3^{(4)}}{3\varepsilon\hbar}+\frac{15\hbar}{4mw}\right)c_3e^{-Kx^2}+c_3x^2e^{-Kx^2}.$$

Diğer yaklaşık özdeğerler, (2.32) polinomundan hesaplanır. a_{22}, b_{22}, a_{24}, b_{24}, a_{44} ve b_{44} katsayılarının değerleri (2.32)' de yerine yazılırsa:

$$\left(\frac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+\frac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}-\frac{\Lambda\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}\right)\left(\frac{69\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{5}{2}}}+\frac{945\varepsilon\hbar^{\frac{11}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{32m^{\frac{11}{2}}w^{\frac{11}{2}}}-\frac{15\Lambda\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{5}{2}}}\right)$$
$$-\left(\frac{9\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+\frac{105\varepsilon\hbar^{\frac{9}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{16m^{\frac{9}{2}}w^{\frac{9}{2}}}-\frac{3\Lambda\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}\right)^2=0,$$

ve buradan da Λ' ın ikinci derece polinomu

$$\Lambda^2\left(\frac{3\hbar^5}{8m^5w^5}\right)+\Lambda\left(-\frac{15\hbar^6}{8m^5w^4}-\frac{135\varepsilon\hbar^7}{16m^7w^7}\right)+\frac{63\hbar^7}{32m^5w^3}+\frac{495\varepsilon\hbar^8}{32m^7w^6}+\frac{1575\varepsilon^2\hbar^9}{128m^9w^9}=0$$

elde edilir. Gerekli düzenlemeler yapılırsa:

$$\Lambda^2+\Lambda\left(-5\hbar w-\frac{45\varepsilon\hbar^2}{2m^2w^2}\right)+\frac{21\hbar^2w^2}{4}+\frac{165\varepsilon\hbar^3}{4m^2w}+\frac{525\varepsilon^2\hbar^4}{16m^4w^4}=0$$

bulunur. Son eşitlikten, aşağıdaki yaklaşık özdeğerler bulunur:

$$\Lambda_2^{(4)}=\frac{5\hbar w}{2}+\frac{45\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}-\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{60\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{375\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}$$

ve

$$\Lambda_4^{(4)}=\frac{5\hbar w}{2}+\frac{45\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}+\frac{1}{2}\sqrt{4\hbar^2w^2+\frac{60\varepsilon\hbar^3}{m^2w}+\frac{375\varepsilon^2\hbar^4}{m^4w^4}}.$$

Dikkat edilirse, $\Lambda_2^{(4)}$, $\Lambda_2^{(2)}$' in geliştirilmiş yaklaşık özdeğeridir.

$\Lambda=\Lambda_2^{(4)}$ ve $\Lambda=\Lambda_4^{(4)}$ için (2.29) sisteminin birinci ve üçüncü eşitlikleri $c_1=0=c_3$ olduğunda sağlanır. Bu durumda,

$$\left.\begin{aligned}(a_{22}-\Lambda b_{22})c_2+(a_{24}-\Lambda b_{24})c_4&=0,\\(a_{42}-\Lambda b_{42})c_2+(a_{44}-\Lambda b_{44})c_4&=0\end{aligned}\right\}\qquad(2.33)$$

elde edilir. Önceden hesaplanan a_{jk} ve b_{jk} $\left(j, k=2,\ 4\right)$ katsayılarının değerleri (2.33) sisteminde yerine yazılsın:

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{3\hbar w}{2}+\frac{15\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}-\Lambda\right)c_2+\left(\frac{9\hbar^2}{4m}+\frac{105\varepsilon\hbar^3}{8m^3w^3}-\frac{3\Lambda\hbar}{2mw}\right)c_4=0,\\ \left(\frac{3\hbar w}{2}+\frac{35\varepsilon\hbar^2}{4m^2w^2}-\Lambda\right)c_2+\left(\frac{23\hbar^2}{4m}+\frac{315\varepsilon\hbar^3}{8m^3w^3}-\frac{5\Lambda\hbar}{2mw}\right)c_4=0.\end{aligned}\right\} \tag{2.34}$$

$A:=\dfrac{3\hbar w}{2}-\Lambda,\ B:=\dfrac{\hbar}{2mw}$ olarak tanımlanırsa, (3.34) sistemi

$$\left.\begin{aligned}\left(A+15\varepsilon B^2\right)c_2+\left(3AB+105\varepsilon B^3\right)c_4=0,\\ \left(A+35\varepsilon B^2\right)c_2+\left(5AB+315\varepsilon B^3+\frac{2\hbar^2}{m}\right)c_4=0\end{aligned}\right\}$$

sistemine dönüşür. Son sistemin ilk eşitliğinden,son eşitliği çıkarılırsa:

$$-20\varepsilon B^2c_2-\left(2AB+\frac{2\hbar^2}{m}+210\varepsilon B^3\right)c_4=0$$

elde edilir. Buradan da,

$$c_2=-\left(\frac{A}{10\varepsilon B}+\frac{\hbar^2}{10m\varepsilon B^2}+\frac{21B}{2}\right)c_4.$$

Yani

$$c_2=-\left(\frac{7mw^2}{10\varepsilon}-\frac{mw\Lambda}{5\varepsilon\hbar}+\frac{21\hbar}{4mw}\right)c_4.$$

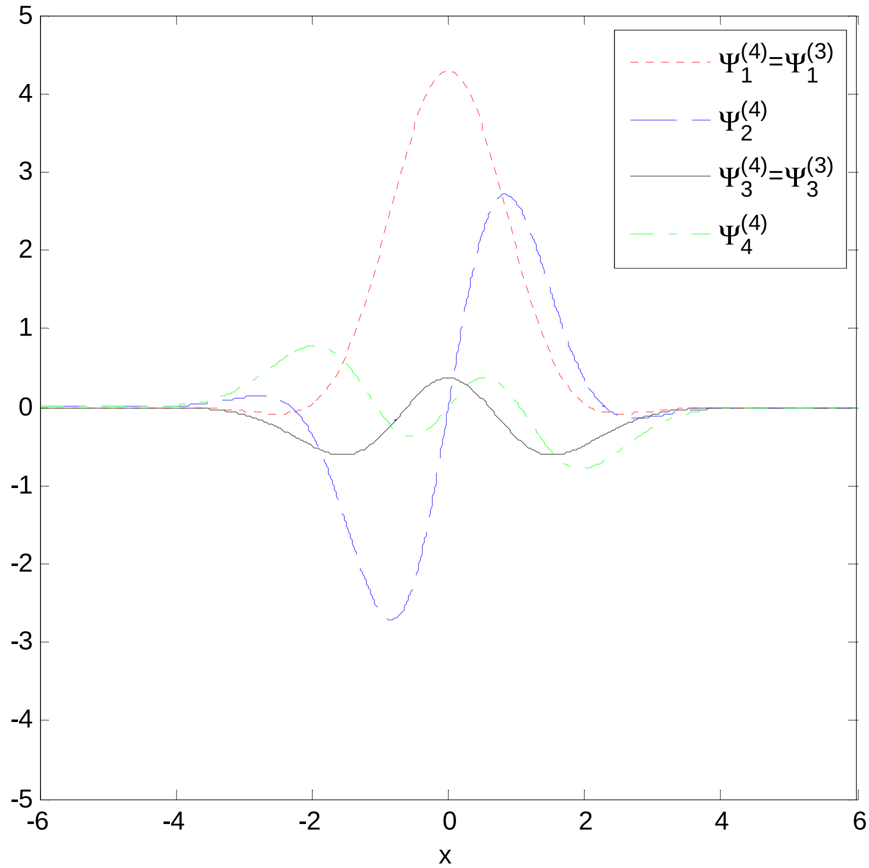
O halde, $\Lambda_2^{(4)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_2^{(4)}$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_2^{(4)}=c_2g_2\left(x\right)+c_4g_4\left(x\right)=-\left(\frac{7mw^2}{10\varepsilon}-\frac{mw\Lambda_2^{(4)}}{5\varepsilon\hbar}+\frac{21\hbar}{4mw}\right)c_4xe^{-Kx^2}+c_4x^3e^{-Kx^2}.$$

$\Lambda_4^{(4)}$ yaklaşık özdeğerine karşılık gelen $\Psi_4^{(4)}$ yaklaşık özfonksiyon;

$$\Psi_4^{(4)}=c_2g_2\left(x\right)+c_4g_4\left(x\right)=-\left(\frac{7mw^2}{10\varepsilon}-\frac{mw\Lambda_4^{(4)}}{5\varepsilon\hbar}+\frac{21\hbar}{4mw}\right)c_4xe^{-Kx^2}+c_4x^3e^{-Kx^2}.$$

N=4 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri aşağıda gösterilmiştir:



Şekil 4. N=4 durumunda elde edilen yaklaşık özfonksiyonların grafikleri

(2.2) bölümündeki bu hesaplamalardan görüldüğü üzere, $N = 1, 2, 3, 4$ değerlerine karşılık elde edilen sonuçlar $\varepsilon = 0$ için literatürdeki harmonik salınım probleminin mevcut sonuçlarıyla uyumludur.

2.3. Kübik εx^3 Terimli Harmonik Olmayan Salınım Problemi

Aşağıdaki problem göz önüne alınsın:

$$\frac{\hbar^2}{2m} y'' - \frac{1}{2} m w^2 x^2 y - \varepsilon x^3 y + \lambda y = 0, \quad \lim_{x\to-\infty} y(x) = 0, \quad \lim_{x\to+\infty} y(x) = 0. \qquad (2.35)$$

$$p(x) = \frac{\hbar^2}{2m}, \; q(x) = -\left\{ \frac{m w^2 x^2}{2} + \varepsilon x^3 \right\}, \; r(x) = 1, \qquad (2.36)$$

olmak üzere, $L := D\left[p(x)D\right] + q(x)$ olarak tanımlanırsa (2.35) denklemi $L[y] + \lambda r(x)y = 0$ şekline dönüşür. $p(x) > 0,\ r(x) > 0$ ve $p'(x),\ r(x),\ q(x)$ fonksiyonları sürekli olduğundan verilen denklem kendine eştir.

Galerkin yöntemini kullanarak problemi çözmek için sınır değerlerini sağlayan lineer bağımsız $g_j(x)$ fonksiyonları bölüm (2.2)' deki gibi seçilsin.

Yaklaşık özdeğerlerin elde edilmesi için gerekli $a_{jk}\ (j,k = 1,2,3)$ katsayıları (2.7) kullanılarak yeniden hesaplanmalıdır. $b_{jk}\ (j,k = 1,2,3)$ katsayıları ise potansiyel fonksiyonunu içermediğinden bölüm (2.2) deki gibidir. Buna göre:

2.3.1. N=1 Durumu

(2.8) sisteminden $\Lambda = \dfrac{a_{11}}{b_{11}}$ olduğu görülür. (2.7)' den,

$$a_{11} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ p(x) g_1'(x) g_1'(x) - q(x) g_1(x) g_1(x) \right\} dx.$$

$p(x)$ ve $q(x)$ in (2.36) ile verilen değerleri, $g_1(x)$ fonksiyonunun (2.11) ile verilen değeri son integralde yerine yazılırsa:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(e^{-Kx^2}\right)' + \left(\frac{mw^2x^2}{2} + \varepsilon x^3\right) e^{-Kx^2} e^{-Kx^2} \right\} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)^2 + \frac{mw^2x^2e^{-2Kx^2}}{2} + \varepsilon x^3 e^{-2Kx^2} \right\} dx \\
&= mw^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2Kx^2} dx + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} x^3 e^{-2Kx^2} dx \\
&= mw^2 \frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} \\
&= \frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}} w^{-\frac{1}{2}}}
\end{aligned}$$

olarak bulunur. Bölüm (2.2.1)' den,

$$b_{11}=\int_{-\infty}^{+\infty} r(x)g_1(x)g_1(x)dx=\frac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}.$$

Böylece,

$$\Lambda_1^{(1)}=\frac{a_{11}}{b_{11}}=\frac{\dfrac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}}w^{-\frac{1}{2}}}}{\dfrac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}}=\frac{\hbar w}{2}$$

olarak elde edilir. Bu durumda yaklaşık özfonksiyon Bölüm 2.2.1' deki gibidir ve grafiği Şekil 1' de verilmiştir.

2.3.2. N=2 Durumu

(2.8) sisteminden ve a_{jk}, b_{jk} katsayılarının simetrik oluşundan,

$$(a_{11}-\Lambda b_{11})(a_{22}-\Lambda b_{22})-(a_{12}-\Lambda b_{12})^2=0 \qquad (2.37)$$

elde edilir. Yaklaşık özdeğerleri bulmak için gerekli olan a_{12}, a_{22}, b_{12} ve b_{22} katsayıları, p(x), q(x), r(x) fonksiyonlarının (2.36) ile verilen değerleri ve $g_j(x)$ $(j=1,2)$ fonksiyonlarının (2.13) ile verilen değerleri kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$a_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_1'(x)g_2'(x)-q(x)g_1(x)g_2(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$\begin{aligned}
a_{12}&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(xe^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^3\right)e^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}\right\}dx\\
&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)\left(e^{-Kx^2}-2Kx^2e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^3e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^4e^{-2Kx^2}\right\}dx\\
&=-\frac{\hbar w}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx\\
&=\frac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}.
\end{aligned}$$

Bölüm (2.2.2)' den,

$$b_{12}=\int_{-\infty}^{+\infty} r(x)g_1(x)g_2(x)dx=0.$$

Benzer şekilde,

$$a_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_2'(x)g_2'(x)-q(x)g_2(x)g_2(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$\begin{aligned}
a_{22} &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(xe^{-Kx^2}\right)'\left(xe^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^3\right)xe^{-Kx^2}xe^{-Kx^2}\right\}dx\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}-2Kx^2e^{-Kx^2}\right)^2+\frac{mw^2x^4e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^5e^{-2Kx^2}\right\}dx\\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2Kx^2}dx-\hbar w\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^5e^{-2Kx^2}dx\\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}-\hbar w\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+mw^2\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}\\
&= \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}.
\end{aligned}$$

Bölüm (2.2.2)' den,

$$b_{22}=\int_{-\infty}^{+\infty} r(x)g_2(x)g_2(x)dx=\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}.$$

Bulunan katsayı değerleri, (2.37) eşitliğinde yerine yazılırsa:

$$\left(\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}}w^{-\frac{1}{2}}}-\frac{\Lambda\hbar^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}w^{\frac{1}{2}}}\right)\left(\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}-\frac{\Lambda\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}\right)-\left(\frac{3\varepsilon\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}\right)^2=0,$$

ve buradan da Λ' ın ikinci derece polinomu

$$\Lambda^2\left(\frac{\hbar^2}{2m^2w^2}\right)+\Lambda\left(-\frac{\hbar^3}{m^2w}\right)+\frac{3\hbar^4}{8m^2}-\frac{9\varepsilon^2\hbar^5}{16m^5w^5}=0$$

olarak bulunur. Gerekli düzenlemeler yapılırsa:

$$\Lambda^2 - 2\Lambda\hbar w + \frac{3\hbar^2 w^2}{4} - \frac{9\varepsilon^2\hbar^3}{8m^3w^3} = 0$$

bulunur. Son eşitlikten, aşağıdaki yaklaşık özdeğerler hesaplanır:

$$\Lambda_1^{(2)} = \hbar w - \frac{1}{2}\sqrt{\hbar^2 w^2 + \frac{9\varepsilon^2\hbar^3}{2m^3w^3}}$$

ve

$$\Lambda_2^{(2)} = \hbar w + \frac{1}{2}\sqrt{\hbar^2 w^2 + \frac{9\varepsilon^2\hbar^3}{2m^3w^3}}.$$

Dikkat edilirse, $\Lambda_1^{(2)}$, $\Lambda_1^{(1)}$ ' in geliştirilmiş yaklaşık özdeğeridir.

N=2 durumundaki yaklaşık özfonksiyonlar Bölüm 2.2.2' deki gibidir ve grafiği Şekil 2' de verilmiştir.

2.3.3. N=3 Durumu

(2.8) sisteminden ve a_{jk}, b_{jk} katsayılarının simetrik oluşundan:

$$\begin{aligned}&(a_{11}-\Lambda b_{11})(a_{22}-\Lambda b_{22})(a_{33}-\Lambda b_{33})-(a_{11}-\Lambda b_{11})(a_{23}-\Lambda b_{23})^2\\ &\quad-(a_{22}-\Lambda b_{22})(a_{13}-\Lambda b_{13})^2-(a_{33}-\Lambda b_{33})(a_{12}-\Lambda b_{12})^2\\ &\quad+2(a_{12}-\Lambda b_{12})(a_{13}-\Lambda b_{13})(a_{23}-\Lambda b_{23})=0\end{aligned} \tag{2.38}$$

elde edilir. Yaklaşık özdeğerleri bulmak için gerekli olan a_{13}, a_{23}, a_{33}, b_{13}, b_{23} ve b_{33} katsayıları, p(x), q(x), r(x) fonksiyonlarının (2.36) ile verilen değerleri ve $g_j(x)$ $(j=1,2,3)$ fonksiyonlarının (2.13) ile verilen değerleri kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$a_{13} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_1'(x)g_3'(x) - q(x)g_1(x)g_3(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}\right)'\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^3\right)e^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}\right\}dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2Kxe^{-Kx^2}\right)\left(2xe^{-Kx^2}-2Kx^3e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^4e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^5e^{-2Kx^2}\right\}dx$$

$$=-\frac{\hbar w}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^5e^{-2Kx^2}dx$$

$$=-\frac{\hbar w}{2}\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}+mw^2\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}}w^{\frac{5}{2}}}$$

$$=\frac{\hbar^{\frac{5}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{1}{2}}}.$$

Bölüm (2.2.3)’ den,

$$b_{13}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_1(x)g_3(x)dx=\frac{\hbar^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}}w^{\frac{3}{2}}}.$$

Benzer şekilde,

$$a_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{p(x)g_2'(x)g_3'(x)-q(x)g_2(x)g_3(x)\right\}dx.$$

O halde,

$$a_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(xe^{-Kx^2}\right)'\left(x^2e^{-Kx^2}\right)'+\left(\frac{mw^2x^2}{2}+\varepsilon x^3\right)xe^{-Kx^2}x^2e^{-Kx^2}\right\}dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(e^{-Kx^2}-2Kx^2e^{-Kx^2}\right)\left(2xe^{-Kx^2}-2Kx^3e^{-Kx^2}\right)+\frac{mw^2x^5e^{-2Kx^2}}{2}+\varepsilon x^6e^{-2Kx^2}\right\}dx$$

$$=\frac{\hbar^2}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-2Kx^2}dx-\frac{3\hbar w}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^3e^{-2Kx^2}dx+mw^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^5e^{-2Kx^2}dx+\varepsilon\int_{-\infty}^{+\infty}x^6e^{-2Kx^2}dx$$

$$=\frac{15\varepsilon\hbar^{\frac{7}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}}w^{\frac{7}{2}}}.$$

Bölüm (2.2.3)’ den,

$$b_{23}=\int_{-\infty}^{+\infty}r(x)g_2(x)g_3(x)dx=0.$$

Benzer şekilde:

$$a_{33} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ p(x) g_3'(x) g_3'(x) - q(x) g_3(x) g_3(x) \right\} dx.$$

O halde,

$$\begin{aligned}
a_{33} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(x^2 e^{-Kx^2} \right)' \left(x^2 e^{-Kx^2} \right)' + \left(\frac{mw^2 x^2}{2} + \varepsilon x^3 \right) x^2 e^{-Kx^2} x^2 e^{-Kx^2} \right\} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(2xe^{-Kx^2} - 2Kx^3 e^{-Kx^2} \right)^2 + \frac{mw^2 x^6 e^{-2Kx^2}}{2} + \varepsilon x^7 e^{-2Kx^2} \right\} dx \\
&= \frac{2\hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2Kx^2} dx - 2\hbar w \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-2Kx^2} dx + mw^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^6 e^{-2Kx^2} dx + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} x^7 e^{-2Kx^2} dx \\
&= \frac{2\hbar^2}{m} \frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} - 2\hbar w \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} + mw^2 \frac{15\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}} w^{\frac{7}{2}}}. \\
&= \frac{11\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{3}{2}}}.
\end{aligned}$$

Bölüm (2.2.3)' den,

$$b_{33} = \int_{-\infty}^{+\infty} r(x) g_3(x) g_3(x) dx = \frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}}.$$

Bulunan katsayı değerleri, (2.38) eşitliğinde yerine yazılırsa:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}} w^{-\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}} w^{\frac{1}{2}}} \right) \left(\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} \right) \left(\frac{11\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{3}{2}}} - \frac{3\Lambda \hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} \right) \\
&- \left(\frac{\hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{1}{2}} w^{-\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{1}{2}} w^{\frac{1}{2}}} \right) \left(\frac{15\varepsilon \hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}} w^{\frac{7}{2}}} \right)^2 - \left(\frac{3\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} \right) \left(\frac{\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} \right)^2 \\
&- \left(\frac{11\hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{3}{2}}} - \frac{3\Lambda \hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} \right) \left(\frac{3\varepsilon \hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} \right)^2 \\
&+2 \left(\frac{3\varepsilon \hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{5}{2}} w^{\frac{5}{2}}} \right) \left(\frac{\hbar^{\frac{5}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{4m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{1}{2}}} - \frac{\Lambda \hbar^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{2m^{\frac{3}{2}} w^{\frac{3}{2}}} \right) \left(\frac{15\varepsilon \hbar^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8m^{\frac{7}{2}} w^{\frac{7}{2}}} \right) = 0.
\end{aligned}$$

Gerekli düzenlemeler yapılırsa Λ ' ın ikinci derece polinomu aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\Lambda^3 - \frac{9\Lambda^2 \hbar w}{2} + \frac{23\Lambda \hbar^2 w^2}{4} - \frac{81\varepsilon^2 \hbar^3}{8m^3 w^3} - \frac{15\hbar^3 w^3}{8} + \frac{117\varepsilon^2 \hbar^4}{16m^3 w^2} = 0.$$

3. SONUÇLAR

Bu çalışmanın literatüre katkıları aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. Bu çalışmada ilk olarak Galerkin yönteminin

   $$L[y]+\lambda r(x)y=0;\ B_1[y]=0,\ B_2[y]=0$$

   Sturm-Liouville problemini

   $$\sum_{j=1}^{N}\left(a_{jk}-\Lambda b_{jk}\right)c_j=0,\ k=1,2,3,...,N,$$

   $$\left.\begin{aligned} a_{jk} &:= \int_{x_1}^{x_2}\left\{p(x)g_j'(x)g_k'(x)-q(x)g_j(x)g_k(x)\right\}dx, \\ b_{jk} &:= \int_{x_1}^{x_2} r(x)g_j(x)g_k(x)dx \end{aligned}\right\}$$

   denklem sistemine dönüştürdüğü gösterilmiştir. Daha sonra bu denklem sisteminde sıfırdan farklı çözümün elde edilmesi için katsayılar determinantı sıfıra eşitlenerek farklı enerji seviyeleri (Λ_n) yaklaşık olarak hesaplanmıştır.
2. Literatürde harmonik salınım problemi iki farklı yöntemle çözülmüştür. Birincisi kuvvet serisi veya Frobenius yöntemiyle, ikincisi operatör cebiri kullanılarak yapılan çözümlerdir. Bu çalışma harmonik salınım probleminin çözümü için yeni bir yöntem sunmaktadır. Sunulan bu yöntem $\varepsilon=0$ için literatürdeki sonuçlarla uyumlu sonuçlar vermektedir. Böylece $\varepsilon\neq 0$ (ε küçük veya büyük) olması durumlarında enerji seviyelerine yaklaşımlar elde edilmiştir.
3. Bu çalışmada ayrıca harmonik olmayan salınım probleminin özfonksiyonları üzerinde de durulmuştur.
4. (2.7) ve (2.8) ile verilen sistem, harmonik olmayan salınım problemi için istenilen N değeri ile enerji seviyelerinin hesaplanmasına imkan sağlar.
5. $\varepsilon\neq 0$ için N=3 ve N=4 iken bulunan yaklaşık enerji seviyeleri, şimdiye kadar verilen sonuçlardan daha da geliştirilmiş değerler olduğu gözlenmektedir.
6. Yöntemin uygulanabilirliği, potansiyeldeki terim değiştirildiğinde elde edilen problem üzerinde de gösterilmiştir. εx^3 terimi ile çalışılarak bazı yaklaşımlar bulunmuştur ve sistemin katsayılar determinantında oluşan simetrikliğin kaybolduğu gözlenmiştir.

4. ÖNERİLER

1. Sunulan bu yöntem bazı nümerik uygulamalarda da kullanılabilir.
2. Farklı problemler için $g_j(x)$ fonksiyonlarının seçimi tartışılabilir.
3. $N \geq 5$ için harmonik olmayan salınım probleminin yaklaşık enerji seviyeleri verilen yöntemle hesaplanabilir.
4. (2.7) ve (2.8) ile verilen sistemden oluşturulacak c_j ’ lerin katsayılar determinantı için bir genelleme yapılabilir.
5. Hilbert uzaylarında harmonik olmayan salınım probleminin enerji seviyeleri üzerine çalışılabilir.
6. İki veya daha çok boyutlu Schrödinger denklemleri için verilen yöntemin uygulanıp-uygulanamayacağı araştırılabilir.

5. KAYNAKLAR

1. Andrews, Larry C., Elementary Partial Differential Equations with Boundary Value Problems, Academic Press Inc., Florida, 1986.

2. Aygün, E. ve Zengin, D.M., Kuantum Fiziği, 3. Basım, Bilim Yayınevi, Ankara, 2003.

3. Bransden, B.H. and Joachain, C.J., Quantum Mechanics, Second Edition, Pearson Education Limited, London, 2000.

4. Coddington, Earl A. and Levinson Norman, Theory of Ordinary Differential Equations, McGraw-Hill Book Company, New York, 1955.

5. Dereli, T. ve Vercin, A., Kuantum Mekaniği I, 1. Basım, ODTÜ Geliştirme Vakfı, Ankara, 2000.

6. Erkoç, Ş., Fundamentals of Quantum Mechanics, Taylor & Francis Group Llc., New York, 2007.

7. Flügge, S., Practical Quantum Mechanics I, Springer-Verlag Berlin, Germany, 1971.

8. Gasiorowicz, S., Quantum Physics, John Wiley & Sons Inc., New York, 1974.

9. Gottfried, K. and Yan, T., Quantum Mechanics: Fundamentals, Second Edition, Springer-Verlag New York, America, 2004.

10. Griffiths, D.J., Intoduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall, Upper Saddle River-New Jersey, 1995.

11. Hecht, K.T., Quantum Mechanics, Springer-Verlag New York, America, 2000.

12. Karaoğlu, B., Kuantum Mekaniğine Giriş, 3. Basım, Bilgi Tek Yayıncılık, İstanbul, 1997.

13. Kutlu, K., Kuantum Fiziğine Giriş, 1. Cilt, Yıldız Teknik Üniversitesi Yayınları, İstanbul, 1991.

14. Liboff, R.L., Introductory Quantum Mechanics, Third Edition, Addison-Wesley Publishing Company, Mass-Reading, 1998.

15. Messiah, A., Quantum Mechanic, Volume I, Fifth Edition, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1966.

16. Nagaosa, N., Tr. by Heusler S., Ouantum Field Theory in Condensed Matter Physics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 1999.

17. Sakurai, J.J., Modern Quantum Mechanics, Revised Edition, Addison-Wesley Publishing Company, Mass-Reading, 1994.

18. White, R.L., Basic Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Company, New York, 1966.

ÖZGEÇMİŞ

Elif BEKAR, 1983 yılında Trabzon’da doğdu. İlk öğrenimini Trabzon İskenderpaşa İlkokulu’nda, orta öğrenimini Trabzon Cumhuriyet Ortaokulu’nda, lise öğrenimini ise Trabzon Beşikdüzü Anadolu Öğretmen Lisesi’nde tamamladı.

2001-2002 Eğitim-Öğretim yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Fatih Eğitim Fakültesi Ortaöğretim Fen ve Matematik Alanları Bölümü Matematik Öğretmenliği programında lisans eğitimine başladı. 2005-2006 Eğitim-Öğretim yılının ilk dönemini Erasmus Öğrenci Değişim Programı kapsamında Danimarka-University South College’ da geçerdi. 2006 yılında lisans eğitiminden matematik öğretmeni unvanıyla birincilikle mezun oldu.

2006-2007 Eğitim-Öğretim yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans (Matematik) programına başladı. TÜBİTAK Yurtiçi Yüksek Lisans Bursu almaya hak kazandı. Kasım 2007 tarihinde Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı’ na Araştırma Görevlisi olarak atandı. Halen bu görevine devam etmektedir.