T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

LİNEER VE LİNEER OLMAYAN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN VARYASYONEL İTERASYON YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLERİ

Ece GÜNEŞ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MATEMATİK ANABİLİM DALI

Danışman : Dr. Öğr. Üyesi Arzu GÜLEROĞLU

EDİRNE-2021

ECE GÜNEŞ'in hazırladığı "**LİNEER VE LİNEER OLMAYAN SCHRÖDİNGER DENKLEMLERİNİN VARYASYONEL İTERASYON YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLERİ**" başlıklı bu tez, tarafımızca okunmuş, kapsam ve niteliği açısından **MATEMATİK** Anabilim Dalında bir **Yüksek lisans tezi** olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri : İmza

Prof. Dr. Figen ÖKE

Doç. Dr. Yasemen UÇAN

Dr. Öğr. Üyesi Arzu GÜLEROĞLU

Tez Savunma Tarihi: 23/02/2021

Bu tezin Yüksek Lisans olarak gerekli şartları sağladığını onaylarım.

İmza

Dr. Öğr. Üyesi Arzu GÜLEROĞLU
Tez Danışmanı

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü onayı

Doç. Dr. Hüseyin Rıza Ferhat KARABULUT
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

T.Ü.FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MATEMATİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS PROGRAMI

DOĞRULUK BEYANI

Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında, tüm verilerin bilimsel ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini, kullanılan verilerde tahrifat yapılmadığını, tezin akademik ve etik kurallara uygun olarak yazıldığını, kullanılan tüm literatür bilgilerinin bilimsel normlara uygun bir şekilde kaynak gösterilerek ilgili tezde yer aldığını ve bu tezin tamamı ya da herhangi bir bölümünün daha önceden Trakya Üniversitesi ya da farklı bir üniversitede tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

23/02/2021

Ece GÜNEŞ

Yüksek Lisans Tezi

Lineer Ve Lineer Olmayan Schrödinger Denklemlerinin Varyasyonel İterasyon Yöntemi İle Çözümleri

T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü

Matematik Anabilim Dalı

ÖZET

Bu çalışmada varyasyonel iterasyon yöntemi kullanılarak, lineer ve lineer olmayan Schrödinger denklemlerinin çözümleri incelenmiştir.

Bu tez beş bölümden oluşmaktadır.

I. Bölümde, varyasyonel iterasyon yöntemi ile ilgili literatür araştırmalarına yer verilmiştir.

II. Bölümde, varyasyonel analiz ile ilgili bazı ön bilgiler verilmiştir.

III. Bölümde, varyasyonel iterasyon yöntemi tanıtılmıştır.

IV. Bölümde, lineer ve lineer olmayan Schrödinger denklemlerinin çözümleri varyasyonel iterasyon yöntemi kullanılarak elde edilmiştir. Bulunan çözümler farklı yöntemler kullanılarak elde edilen çözümler ile karşılaştırılmıştır.

V. Bölümde, varyasyonel iterasyon yöntemiyle yaptığımız bu çalışmalar sonrasındaki çıkarımlarımızdan oluşan sonuç ve tartışma bölümü verilmiştir.

Yıl : 2021

Sayfa Sayısı : 54

Anahtar Kelimeler : Varyasyonel iterasyon yöntemi, Lagrange çarpanı, Schrödinger denklemi.

Master Thesis
Solutions of Linear and Nonlinear Schrödinger Equations by Variational Iteration Method
Trakya University Institute of Natural Sciences
Department of Mathematics

ABSTRACT

In this study, solutions of linear and nonlinear Schrödinger equations are investigated using the variational iteration method.

This thesis consists of five sections.

In Section I, literature studies on the variational iteration method are included.

In Section II, some preliminary information about variational analysis is given.

In Section III, variational iteration method is introduced.

In Section IV, the solutions of the linear and nonlinear Schrödinger equations are obtained using the variational iteration method. The solutions found are compared with the solutions obtained using different methods.

In Section V, the results and discussion section consisting of our deductions after the studies we have done with the variational iteration method is given.

Year : 2021

Number of Pages : 54

Keywords : Variational iteration method, Lagrange multiplier, Schrödinger equation.

ÖNSÖZ

Tez çalışmam boyunca kendisiyle çalışmaktan mutluluk duyduğum; desteklerini ve yardımlarını esirgemeyen çok kıymetli danışman hocam Dr. Öğr. Üyesi Arzu GÜLEROĞLU'na saygılarımı ve teşekkürlerimi sunarım. Bu süreçte maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen aileme desteklerinden dolayı teşekkür ederim.

Ece GÜNEŞ

İÇİNDEKİLER

SİMGELER DİZİNİ

L^2	Karesi integrallenebilen fonksiyonların uzayı
δ	Varyasyon
V	Potansiyel
$\widetilde{u_n}$	u_n fonksiyonunun kısıtlı varyasyonu
λ	Lagrange çarpanı
∇^2	Laplace operatörü
ψ	Dalga fonksiyonu
L	Lineer operatör
N	Lineer olmayan operatör
u	Çözüm fonksiyonu
$i^2 = -1$	Sanal birim
t	Zaman
h	Planck sabiti
$\hbar$	$h/2\pi$
$C(0,1)$	$[0,1]$ aralığı üzerinde tanımlı olan sürekli fonksiyonların uzayı
$D(x_0, x_1)$	$[x_0, x_1]$ aralığı üzerinde tanımlı, birinci mertebeden türevleri var ve sürekli olan fonksiyonların uzayı

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Doğada olayların matematiksel modellenmesi diferansiyel denklemlerin kullanılmasıyla açıklanmaktadır. Bu nedenle diferansiyel denklemlerin çözümleri uygulamalı matematik, fizik ve mühendislikte çok önemli bir yere sahiptir. Diferansiyel denklemlerin analitik çözümlerini elde etmek her zaman mümkün olmadığı için yaklaşık çözüm veren yöntemlerin kullanımı yaygın hale gelmiştir. Varyasyonel iterasyon yöntemi, diferansiyel denklemlerin çözümlerinin araştırılmasında kullanılan etkili ve güvenilir bir yaklaşık yöntemdir.

J. H. He ilk olarak 1997'de varyasyonel iterasyon yöntemi olarak adlandırdığı yöntemi lineer olmayan diferansiyel denklemleri çözmek için önermiştir. Daha sonra Abdou ve Soliman (2005) birleşik Burger denklemlerini, He ve Wu (2007) lineer olmayan dalga denklemini, lineer olmayan kesirli diferansiyel denklemleri ve lineer olmayan salınım denklemini, Hemeda (2008) dalga denklemini, Wazwaz (2009) , lineer ve lineer olmayan adi diferansiyel denklemleri, Jafari, Chun ve Khalique (2011) lineer olmayan gaz dinamik denklemlerini, Altıntan ve Uğur (2011) birinci mertebeden diferansiyel denklem sistemlerini, Hosseinzadeh (2017) başlangıç koşullu lineer olmayan Schrödinger denklemini, Wazwaz ve El-Tantawy (2019) optik Gaussons için lineer olmayan logaritmik Schrödinger denklemini, He ve Latifizadeh (2020) lineer olmayan diferansiyel denklemleri varyasyonel iterasyon yöntemini kullanarak incelemişlerdir.

Varyasyonel iterasyon yöntemi, homojen, homojen olmayan, lineer ve lineer olmayan diferansiyel denklemlerin yaklaşık çözümlerini elde etmek için kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntemde, bir başlangıç veya sınır-değer problemi ile verilen diferansiyel denklem için genel bir Lagrange çarpanını içeren bir düzeltme fonksiyoneli oluşturulur.

Lagrange çarpanı düzeltme fonksiyonelinin varyasyonu hesaplanarak belirlenir. Belirlenen Lagrange çarpanı ile düzeltme fonksiyonelinin ifadesinden varyasyonel iterasyon formülü bulunur. Başlangıç veya sınır koşullarını sağlayan bir başlangıç yaklaşımı seçilir. Başlangıç yaklaşımı kullanılarak varyasyonel iterasyon formülü, problemin çözümü için ardışık yaklaşımlar verir. Problemin çözümü, bulunan ardışık yaklaşımların oluşturduğu dizinin limiti alınarak elde edilir. Varyasyonel iterasyon yöntemi, problemin fiziksel davranışını değiştirebilecek herhangi bir kısıtlayıcı varsayım veya dönüşüm olmaksızın hızlı bir şekilde yakınsayan ardışık yaklaşımlar verdiği için güçlü bir yöntemdir.

Varyasyonel iterasyon yöntemini uygulayacağımız Schrödinger denklemi kuantum sistemleri hakkında bilgi veren bir kısmi diferansiyel denklemdir. Kuantum dalga sistemlerinin zamana bağlı değişimini ifade eden bu denklemi ilk keşfeden Avusturyalı fizikçi Erwin Schrödinger olmuştur. Bundan dolayı denklem Schrödinger adıyla anılır(Karaoğlu, 1994).

Bu çalışmada varyasyonel iterasyon yöntemi kullanılarak zamana bağlı lineer ve lineer olmayan Schrödinger denklemlerinin çözümleri araştırılmıştır.

BÖLÜM 2

ÖN BİLGİLER

2.1. Tanım:

Bir normlu uzay üzerinde tanımlanan reel değerli bir fonksiyona **fonksiyonel** denir.

Örneğin; her $y \in C(0,1)$ için,

$I[y] = \int_0^1 y(x)dx$

biçiminde tanımlanan I fonksiyonu $C(0,1)$ uzayı üzerinde tanımlı bir fonksiyoneldir(Gelfand & Fomin, 1963, Kolmogorov & Fomin, 1961).

2.2. Tanım:

Bir M normlu uzayı üzerinde tanımlı bir I fonksiyonelinde, $y \in M$ bağımsız değişkeninin artımına y'nin varyasyonu denir ve δy ile gösterilir(Elsgolts, 1978).

2.3. Tanım:

M bir normlu uzay ve I, M üzerinde tanımlı bir fonksiyonel olsun. Her $\varepsilon > 0$ için $\|y - y^*\| < \delta$ iken $|I[y] - I[y^*]| < \varepsilon$ olacak biçimde bir $\delta > 0$ var ise I fonksiyoneline $y^* \in M$ üzerinde **süreklidir** denir(Gelfand & Fomin, 1963, Günay, 1978).

2.4. Tanım:

M bir normlu uzay ve L, M normlu uzayı üzerinde tanımlı bir fonksiyonel olsun.

(i) Her $y \in M$ ve her $c \in \mathbb{R}$ için $L[cy] = cL[y]$

(ii) Her $y_1, y_2 \in M$ için $L[y_1 + y_2] = L[y_1] + L[y_2]$

şartlarını sağlıyor ise L fonksiyoneline bir **lineer fonksiyoneldir** denir(Günay, 1978).

2.5. Tanım:

M bir normlu uzay ve I, M üzerinde tanımlı bir fonksiyonel olsun. $y \in M$ değişkeninin bir δy artımına karşılık I fonksiyonelinin artımı

$$\Delta I[\delta y] = I[y + \delta y] - I[y] \tag{2.1}$$

biçimindedir ve

$$\Delta I[\delta y] = L[y, \delta y] + \varepsilon \|\delta y\| \tag{2.2}$$

şeklinde gösterilir. L, δy'nin lineer bir fonksiyonelidir. $\|\delta y\| \to 0$ iken $\varepsilon \to 0$ ise ΔI artımının δy'ye göre lineer kısmı olan L fonksiyoneline, I fonksiyonelinin **varyasyonu(diferansiyeli)** denir ve δI ile gösterilir. Bu durumda I fonksiyoneline, y üzerinde **diferansiyellenebilirdir** denir (Gelfand & Fomin, 1963, Günay, 1978).

2.6. Tanım:

Eğer I fonksiyonelinin, $y = y_0$ eğrisine yeteri kadar yakın eğriler için aldığı değer, daima $I[y_0]$ değerinden küçük, yani $\Delta I[y] = I[y] - I[y_0] \leq 0$ ise I fonksiyoneli $y = y_0$ eğrisi üzerinde maksimum değer alır.

I fonksiyonelinin, $y = y_0$ eğrisine yeteri kadar yakın eğriler için aldığı değer, daima $I[y_0]$ değerinden büyük, yani $\Delta I = I[y] - I[y_0] \geq 0$ ise I fonksiyoneli $y = y_0$ eğrisi üzerinde minimum değer alır (Günay, 1978).

2.7. Teorem:

Diferansiyellenebilir bir I fonksiyonelinin $y = y_0$ fonksiyonunda bir ekstremuma sahip olması için gerekli koşul varyasyonunun $y = y_0$ için sıfır olmasıdır. Yani, $\delta I[\delta y] = 0$ olmasıdır(Gelfand &Fomin, 1963, Günay, 1978).

Kanıt:

I fonksiyonelinin $y = y_0$ için bir minimuma sahip olduğunu varsayalım. Tanım 2.5'e göre, $\|\delta y\| \to 0$ iken $\varepsilon \to 0$ ise

$$\Delta I[\delta y] = \delta I[\delta y] + \varepsilon \|\delta y\| \tag{2.3}$$

olur. Böylece yeterince küçük $\|\delta y\|$ için, $\Delta I[\delta y]$'nin işareti, $\delta I[\delta y]$'nin işareti ile aynı olacaktır. $y = y_0$ fonksiyonu için,

$$\delta I[\delta y_0] \neq 0$$

olduğunu varsayalım. Bu durumda, herhangi bir $\alpha > 0$ için, α ne kadar küçük olursa olsun

$\delta I[-\alpha\delta y_0] = -\delta I[\alpha\delta y_0]$ (2.4)

olur. Bu nedenle, $\Delta I[\delta y(x)]$, yeterince küçük $\|\delta y\|$ için de aynı işarete sahip olur. Ancak I'nın $y = y_0$ için minimum olduğunu varsaydığımızdan çelişki ortaya çıkar. Diğer bir deyişle, yeterince küçük tüm $\|\delta y\|$ değerleri için,

$\Delta I[\delta y] = I[\,y_0 + \delta y] - I[\,y_0] \geq 0$ (2.5)

dır. Bu çelişki $\delta I[\,\delta y_0] = 0$ olması gerektiğini kanıtlar(Gelfand & Fomin, 1963, Günay, 1978).

2.8. Ön Teorem:

α, $[x_0, x_1]$ aralığında sürekli bir fonksiyon ve

$\delta y(x_0) = \delta y(x_1) = 0$

koşulunu sağlayan her $\delta y \in D_1(x_0, x_1)$ fonksiyonu için

$\int_{x_0}^{x_1} \alpha(x)\delta y'(x)\,dx = 0$

ise c bir sabit olmak üzere her $x \in [x_0, x_1]$ için $\alpha(x) = c$ olur.

Kanıt:

c,

$\int_{x_0}^{x_1} [\alpha(x) - c]\,dx = 0$

koşulunu sağlayan bir sabit ve

$\delta y(x) = \int_{x_0}^{x} [\alpha(\varepsilon) - c]\,d\varepsilon$

olsun. Bu durumda $\delta y \in D_1(x_0, x_1)$ olur ve $\delta y(x_0) = \delta y(x_1) = 0$ koşulu sağlanır. Buna göre

$\int_{x_0}^{x_1} [\alpha(x) - c]\delta y'(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} \alpha(x)\delta y'(x)\,dx - c[\delta y(x_1) - \delta y(x_0)] = 0$

olur. Diğer taraftan,

$\int_{x_0}^{x_1} [\alpha(x) - c]\delta y'(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} [\alpha(x) - c]^2\,dx$

biçiminde yazılır. Böylece

$\alpha(x) - c = 0$

bulunur. Bu durumda her $x \in [x_0, x_1]$ için $\alpha(x) = c$ bulunur(Gelfand & Fomin, 1963).

2.9. Ön Teorem:

α ve β $[x_0, x_1]$ aralığında sürekli fonksiyonlar ve

$\delta y(x_0) = \delta y(x_1) = 0$

koşulunu sağlayan her $\delta y \in D_1(x_0, x_1)$ fonksiyonu için

$$\int_{x_0}^{x_1} [\alpha(x)\delta y(x) + \beta(x)\delta y'(x)]dx = 0 \qquad (2.6)$$

ise $\beta(x)$ diferansiyellenebilirdir ve her $x \in [x_0, x_1]$ için $\beta'(x) = \alpha(x)$ olur.

Kanıt:

$$A(x) = \int_{x_0}^{x} \alpha(\varepsilon)d\varepsilon$$

fonksiyonunu alalım.

$$\int_{x_0}^{x_1} \alpha(x)\delta y(x)dx$$

integraline kısmi integrasyon uygulandığında,

$$\int_{x_0}^{x_1} \alpha(x)\delta y(x)dx = -\int_{x_0}^{x_1} A(x)\delta y'(x)dx$$

olarak bulunur. Böylece (2.6) eşitliği

$$\int_{x_0}^{x_1} [-A(x) + \beta(x)]\delta y'(x)dx = 0$$

biçiminde yazılabilir. 2.8. Ön Teorem'e göre $\beta(x) - A(x) = sabit$ olduğundan $A(x)$'in tanımı kullanılarak her $x \in [x_0, x_1]$ için $\beta'(x) = \alpha(x)$ bulunur(Gelfand & Fomin, 1963).

2.10. Teorem:

$C(x_0, x_1)$ uzayında tanımlanan

$$I[y] = \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y')\,dx$$

fonksiyonelinin ve $y(x_0) = y_0$, $y(x_1) = y_1$ sınır koşulları sağlayan $y = y(x)$ fonksiyonunda bir ekstremuma sahip olması için gerekli koşul, $y = y(x)$'in

$$F_y(x, y, y') - \frac{d}{dx}F_{y'}(x, y, y') = 0$$

Euler denklemini sağlamasıdır.

Kanıt:

$\delta y(x_0) = \delta y(x_1) = 0$ sınır koşulları sağlanacak şekilde y fonksiyonuna bir δy artımı verdiğimizi varsayalım. Bu durumda I fonksiyoneline karşılık gelen artım

$$
\begin{aligned}
\Delta I[y] &= I[y+\delta y] - I[y] \\
&= \int_{x_0}^{x_1} F(x, y+\delta y, y'+\delta y')\,dx - \int_{x_0}^{x_1} F(x,y,y')\,dx \\
&= \int_{x_0}^{x_1} F[(x, y+\delta y, y'+\delta y') - F(x,y,y')]\,dx
\end{aligned}
$$

olur. Taylor teoremini kullanarak bu ifade

$$
\Delta I[y] = \int_{x_0}^{x_1}\left[F_y(x,y,y')\delta y(x) + F_{y'}(x,y,y')\delta y'(x)\right]dx + \cdots \tag{2.7}
$$

biçiminde yazılabilir. (2.7) eşitliğinin sağındaki integral, $\Delta I[y]$ artımının lineer bir parçasıdır ve 2.5. Tanım'a göre I fonksiyonelinin varyasyonunu verir. Buna göre

$$
\delta I[\delta y] = \int_{x_0}^{x_1}\left[F_y(x,y,y')\delta y + F_{y'}(x,y,y')\delta y'\right]dx
$$

olur. 2.7. Teorem'e göre I fonksiyonelinin $y = y(x)$ fonksiyonunda bir ekstremuma sahip olması için

$$
\delta I[\delta y] = \int_{x_0}^{x_1}\left[F_y(x,y,y')\delta y + F_{y'}(x,y,y')\delta y'\right]dx = 0 \tag{2.8}
$$

olması gerekir. Bu durumda 2.9. Ön Teorem'den

$$
F_y(x,y,y') - \frac{d}{dx}F_{y'}(x,y,y') = 0
$$

elde edilir(Gelfand & Fomin, 1963, Günay, 1978).

BÖLÜM 3

VARYASYONEL İTERASYON YÖNTEMİ

1978'de Inokuti ve arkadaşları, matematiksel fiziğin lineer olmayan problemlerini çözmek için genel bir Lagrange çarpanı yöntemi önermişlerdir. 1997'de Çinli matematikçi J.H. He, genel Lagrange çarpanı yönteminden yararlanarak varyasyonel iterasyon yöntemini geliştirmiştir. He'nin varyasyonel iterasyon yönteminde, L lineer bir operatör, N lineer olmayan bir operatör ve g bilinen bir analitik fonksiyon olmak üzere,

$$Lu(x) + Nu(x) = g(x) \tag{3.1}$$

lineer olmayan diferansiyel denklemi göz önüne alınır. (3.1) denklemi için

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x \lambda(\varepsilon)\,(Lu_n(\varepsilon) + N\widetilde{u_n}(\varepsilon) - g(\varepsilon))d\varepsilon,\ n \geq 0 \tag{3.2}$$

biçimindeki düzeltme fonksiyoneli denilen denklem oluşturulur. λ, varyasyonel analiz ile belirlenen bir genel Lagrange çarpanıdır. u_0 bilinmeyenleri içerebilen ilk yaklaşım ve $n \geq 1$ için u_n n. yaklaşımdır. $\widetilde{u_n}$ kısıtlı varyasyon olarak kabul edilir, yani $\delta\widetilde{u_n} = 0$ alınır. (3.2) fonksiyonelinin varyasyonu alınırsa,

$$\begin{aligned}\delta u_{n+1}(x) &= \delta u_n(x) + \delta \int_0^x \lambda(\varepsilon)(Lu_n(\varepsilon) + N\widetilde{u_n}(\varepsilon) - g(\varepsilon))d\varepsilon \\ &= \delta u_n(x) + \delta \int_0^x \delta\lambda(\varepsilon)(Lu_n(\varepsilon) - g(\varepsilon))d\varepsilon \\ &= 0\end{aligned}$$

elde edilir. Buradan oluşturulan koşullar kullanılarak λ Lagrange çarpanı hesaplanır. λ için bulunan ifade (3.2) düzeltme fonksiyonelinde yerine yazıldığında bir iterasyon formülü elde edilir. Genellikle başlangıç veya sınır koşullarını sağlayacak şekilde bir u_0 ilk yaklaşım fonksiyonu seçilir. u_0 yaklaşımı ve iterasyon formülü ile $n \geq 0$ için u_{n+1} ardışık yaklaşımları kolayca bulunur. Sonuç olarak, çözüm

$$u(x) = \lim_{n\to\infty} u_n(x)$$

ile verilir(He, 1997).

Varyasyonel iterasyon yönteminin doğruluğunu ve güvenirliliğini göstermek için yöntemi aşağıdaki adi ve kısmi diferansiyel denklemlere uygulayalım.

3.1. Örnek:

$u'' + u' = 0, u(0) = 1,\ u'(0) = 1$

başlangıç değer problemini göz önüne alalım(Wazwaz, 2009). Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre düzeltme fonksiyoneli aşağıdaki gibidir:

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(u_n''(\varepsilon) + \widetilde{u_n'}(\varepsilon)\right) d\varepsilon, \quad n \geq 0. \tag{3.3}$$

Burada $\widetilde{u_n'}$ kısıtlı varyasyon, yani $\delta\widetilde{u_n'} = 0$ olmak üzere, (3.3) denkleminin her iki tarafının varyasyonu alınırsa,

$$\begin{aligned}
\delta u_{n+1}(x) &= \delta u_n(x) + \delta \int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(u_n''(\varepsilon) + \widetilde{u_n'}(\varepsilon)\right) d\varepsilon \\
&= \delta u_n(x) + \delta \int_0^x \lambda(\varepsilon) u_n''(\varepsilon)\, d\varepsilon \\
&= \left(1 - \lambda'(\varepsilon)\right) \delta u_n(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} + \lambda(\varepsilon)\delta u_n'(\varepsilon)|_{\varepsilon=x} - \int_0^x \lambda''(\varepsilon)\delta u_n(\varepsilon) d\varepsilon \\
&= 0
\end{aligned}$$

biçiminde elde edilir. Buradan,

$$\begin{aligned}
&1 - \lambda'(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} = 0, \\
&\lambda(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} = 0\ , \\
&\lambda''(\varepsilon) = 0
\end{aligned} \tag{3.4}$$

koşulları bulunur. (3.4) denklem sisteminden,

$$\lambda(\varepsilon) = \varepsilon - x \tag{3.5}$$

elde edilir. (3.5) Lagrange çarpanı (3.3) düzeltme fonksiyonelinde yerine yazıldığında

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x (\varepsilon - x)\left(u_n''(\varepsilon) + u_n'(\varepsilon)\right) d\varepsilon, \qquad n \geq 0 \tag{3.6}$$

iterasyon formülü belirlenir.

$u(0) = 1, u'(0) = 1$ koşullarından, başlangıç yaklaşımı

$u_0(x) = 1 + x$

seçilebilir. u_0 yaklaşımı (3.6) iterasyon formülünde kullanıldığında

$$u_1(x) = 1 + x - \frac{1}{2!}x^2 - \frac{1}{3!}x^3,$$

$$u_2(x) = 1 + x - \frac{1}{2!}x^2 - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{4!}x^4 + \frac{1}{5!}x^5,$$

$u_3(x) = 1 + x - \frac{1}{2!}x^2 - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{4!}x^4 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{6!}x^6 - \frac{1}{7!}x^7,$

$\vdots$

$$u_n(x) = \left(1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 + \cdots + \frac{(-1)^n}{(2n)!}x^{2n}\right)$$
$$+ \left(x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \cdots + \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}x^{2n+1}\right)$$

yaklaşımları elde edilir. Buradan, varyasyonel iterasyon yöntemine göre verilen başlangıç değer problemi için

$$u(x) = \lim_{n\to\infty} u_n(x)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!}x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}x^{2n+1}$$
$$= \cos x + \sin x$$

çözümü bulunur(Wazwaz, 2009).

3.2. Örnek:

$$u'' + \frac{2}{x}u' - 6u - 4u\ln u = 0, \qquad u(0) = 1, u'(0) = 0$$

başlangıç değer problemini alalım(Yıldırım, Öziş, 2009). Varyasyonel iterasyon yöntemine göre bu denkleme karşılık gelen düzeltme fonksiyoneli $n \geq 0$ için aşağıdaki gibidir:

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(u_n''(\varepsilon) + \frac{2}{\varepsilon}u_n'(\varepsilon) - 6\widetilde{u_n}(\varepsilon) - 4\widetilde{u_n}(\varepsilon)\ln\left(\widetilde{u_n}(\varepsilon)\right)\right)d\varepsilon \qquad (3.7)$$

$\widetilde{u_n}$ kısıtlı varyasyon, yani $\delta\widetilde{u_n} = 0$ olmak üzere, (3.7) denklemin her iki tarafının varyasyonu alınırsa,

$$\delta u_{n+1}(x) = \delta u_n(x) + \delta\int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(u_n''(\varepsilon) + \frac{2}{\varepsilon}u_n'(\varepsilon) - 6\widetilde{u_n}(\varepsilon) - 4\widetilde{u_n}(\varepsilon)\ln\left(\widetilde{u_n}(\varepsilon)\right)\right)d\varepsilon$$
$$= \delta u_n(x) + \delta\int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(u_n''(\varepsilon) + \frac{2}{\varepsilon}u_n'(\varepsilon)\right)d\varepsilon$$
$$= \left(1 - \lambda'(\varepsilon) + \frac{2}{\varepsilon}\lambda(\varepsilon)\right)\delta u_n(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} + \lambda(\varepsilon)\delta u_n'(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x}$$
$$+ \int_0^x \left(\lambda''(\varepsilon) - 2\frac{\varepsilon\lambda'(\varepsilon) - \lambda(\varepsilon)}{\varepsilon^2}\right)\delta u_n(\varepsilon)d\varepsilon$$
$$= 0$$

bulunur. Buradan,

$$\left(1 - \lambda'(\varepsilon) + \frac{2}{\varepsilon}\lambda(\varepsilon)\right)\Big|_{\varepsilon=x} = 0,$$
$$\lambda(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} = 0, \qquad (3.8)$$
$$\lambda''(\varepsilon) - 2\frac{\varepsilon\lambda'(\varepsilon) - \lambda(\varepsilon)}{\varepsilon^2} = 0$$

koşulları elde edilir. Böylece, (3.8) denklem sistemi çözülerek

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{x} - \varepsilon \tag{3.9}$$

bulunur. (3.9) Lagrange çarpanı, (3.7) düzeltme fonksiyonelinde yerine yazıldığında iterasyon formülü $n \geq 0$ için,

$$u_{n+1}(x) = u_n(x) + \int_0^x \left(\frac{\varepsilon^2}{x} - \varepsilon\right)\left(u_n''(\varepsilon) + \frac{2}{x}u_n'(\varepsilon) - 6u_n(\varepsilon) - 4u_n(\varepsilon)\ln\big(u_n(\varepsilon)\big)\right) d\varepsilon \tag{3.10}$$

biçiminde belirlenir.

$u(0) = 1$ başlangıç koşulundan, başlangıç yaklaşımı

$$u_0(x) = u(0) = 1$$

biçiminde seçilir ve bu yaklaşım (3.10) iterasyon formülünde kullanılırsa

$$u_1(x) = 1 + x^2\,,$$

$$u_2(x) = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!},$$

$$u_3(x) = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!},$$

$$\vdots$$

$$u_n(x) = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} + \frac{x^{10}}{5!} + \cdots + \frac{x^{2n}}{n!}$$

yaklaşımları bulunur. Böylece, başlangıç değer probleminin çözümü varyasyonel iterasyon yöntemine göre

$$\begin{aligned} u(x) &= \lim_{n\to\infty} u_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n}}{n!} \\ &= e^{x^2} \end{aligned}$$

biçiminde elde edilir(Yıldırım, Öziş, 2009).

3.3. Örnek:

$$u_x + u_y + u_z - 3u = 0$$

lineer kısmi diferansiyel denklemini,

$$u(0,y,z) = e^{y+z}\,,\ u(x,0,z) = e^{x+z},\ u(x,y,0) = e^{x+y} \tag{3.11}$$

başlangıç koşullarıyla varyasyonel iterasyon yöntemini kullanarak çözelim (Olayiwola, 2015). Bu denklem için düzeltme fonksiyoneli;

$$u_{n+1}(x,y,z) = u_n(x,y,z) + \int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(\frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)}{\partial y} + \frac{\partial \widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)}{\partial z}\right.$$
$$\left. -3\left(\widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)\right)\right) d\varepsilon,\ n \geq 0 \qquad (3.12)$$

biçimindedir. $\widetilde{u_n}$ kısıtlı varyasyon, yani $\delta\widetilde{u_n} = 0$ olmak üzere, (3.12) denkleminin her iki tarafının varyasyonu alınırsa,

$$\delta u_{n+1}(x,y,z) = \delta u_n(x,y,z) + \delta\int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(\frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial \widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)}{\partial y} + \frac{\partial \widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)}{\partial z}\right.$$
$$\left. -3\left(\widetilde{u_n}(\varepsilon,y,z)\right)\right) d\varepsilon$$
$$= \delta u_n(x,y,z) + \delta\int_0^x \lambda(\varepsilon)\frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$
$$= \left(1+\lambda(\varepsilon)\right)\delta u_n(\varepsilon,y,z)\Big|_{\varepsilon=x} - \int_0^x \lambda'(\varepsilon)\delta u_n(\varepsilon,y,z)d\varepsilon$$
$$= 0$$

bulunur. Buradan,

$$1+\lambda(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} = 0, \qquad (3.13)$$
$$\lambda'(\varepsilon) = 0$$

koşulları elde edilir. Böylece (3.13) denklem sisteminden Lagrange çarpanı

$$\lambda(\varepsilon) = -1 \qquad (3.14)$$

olarak bulunur. (3.14) Lagrange çarpanı, (3.12) düzeltme fonksiyonelinde yerine yazıldığında iterasyon formülü

$$u_{n+1}(x,y,z) = u_n(x,y,z) + \int_0^x \lambda(\varepsilon)\left(\frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial y} + \frac{\partial u_n(\varepsilon,y,z)}{\partial z}\right.$$
$$\left. -3\left(u_n(\varepsilon,y,z)\right)\right) d\varepsilon,\ n \geq 0 \qquad (3.15)$$

biçiminde belirlenir.

(3.11) başlangıç koşulundan, ilk yaklaşım

$$u_0(x,y,z) = u(0,y,z) = e^{y+z}$$

seçilebilir. u_0 yaklaşımı (3.15) iterasyon formülünde kullanılarak

$$u_1(x,y,z) = e^{y+z} + xe^{y+z},$$

$$u_2(x,y,z) = e^{y+z} + xe^{y+z} + \frac{1}{2!}x^2e^{y+z},$$

$u_3(x,y,z) = e^{y+z} + xe^{y+z} + \frac{1}{2!}x^2e^{y+z} + \frac{1}{3!}x^3e^{y+z},$

$\vdots$

$u_n(x,y,z) = \left(1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{4!}x^4 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n\right)e^{y+z}$

yaklaşımları elde edilir. Buradan, varyasyonel iterasyon yöntemine göre verilen başlangıç değer problemi için

$$\begin{aligned} u(x,y,z) &= \lim_{n\to\infty} u_n(x,y,z) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{n!}x^n\right)e^{y+z} \\ &= e^{x+y+z} \end{aligned}$$

çözümü bulunur(Olayiwola, 2015).

3.4. Örnek:

$u_t + uu_x = x$

denklemini,

$$u(x,0) = 2 \qquad (3.16)$$

başlangıç koşuluyla göz önüne alalım(Chakraverty, Mahato, Karunakar & Rao, 2019). Bu denkleme karşılık gelen düzeltme fonksiyoneli, varyasyonel iterasyon yöntemine göre

$$u_{n+1}(x,t) = u_n(x,t) + \int_0^t \lambda(\varepsilon)\left(\frac{\partial u_n(x,\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \widetilde{u_n}(x,\varepsilon)\frac{\partial \widetilde{u_n}(x,\varepsilon)}{\partial x} - x\right)d\varepsilon,\ n \geq 0 \qquad (3.17)$$

biçimindedir. $\widetilde{u_n}$ kısıtlı varyasyon, yani $\delta\widetilde{u_n} = 0$ olmak üzere, (3.17) denkleminin her iki tarafının varyasyonu alınırsa,

$$\begin{aligned} \delta u_{n+1}(x,t) &= \delta u_n(x,t) + \delta\int_0^t \lambda(\varepsilon)\left(\frac{\partial u_n(x,\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \widetilde{u_n}(x,\varepsilon)\frac{\partial \widetilde{u_n}(x,\varepsilon)}{\partial x} - x\right)d\varepsilon \\ &= \delta u_n(x,t) + \delta\int_0^t \lambda(\varepsilon)\frac{\partial u_n(x,\varepsilon)}{\partial \varepsilon}d\varepsilon \\ &= \Big(1 + \lambda(\varepsilon)\Big)\delta u_n(x,\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=t} - \int_0^t \lambda'(\varepsilon)\delta u_n(x,\varepsilon)d\varepsilon \\ &= 0 \end{aligned}$$

elde edilir. Buradan,

$$1 + \lambda(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=x} = 0, \qquad (3.18)$$

$\lambda'(\varepsilon) = 0$

koşulları bulunur. (3.18) denklem sistemi çözülerek

$$\lambda(\varepsilon) = -1 \qquad (3.19)$$

elde edilir. (3.19) Lagrange çarpanı, (3.17) düzeltme fonksiyonelinde yerine yazıldığında

$$u_{n+1}(x,t) = u_n(x,t) - \int_0^t \left(\frac{\partial u_n(x,\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + u_n(x,\varepsilon)\frac{\partial u_n(x,\varepsilon)}{\partial x} - x\right) d\varepsilon,\ n \geq 0 \qquad (3.20)$$

iterasyon formülü belirlenir.

(3.16) koşulundan, ilk yaklaşım

$$u_0(x,t) = u(x,0) = 2$$

seçilebilir. u_0 yaklaşımı (3.20) iterasyon formülünde kullanılarak

$$u_1(x,t) = 2 + xt,$$

$$u_2(x,t) = 2 + xt - t^2 - x\frac{t^3}{3},$$

$$u_3(x,t) = 2 + xt - t^2 - x\frac{t^3}{3} + \frac{5}{12}t^4 + \frac{2}{15}xt^5 - \frac{61}{720}t^6 + \frac{17}{315}t^7,$$

$$\vdots$$

$$u_n(x,t) = 2\left(1 - \frac{1}{2}t^2 + \frac{5}{24}t^4 - \frac{61}{720}t^6 + \cdots\right) + x\left(t - \frac{1}{3}t^3 + \frac{2}{15}t^5 - \frac{17}{315}t^7 + \cdots\right)$$

yaklaşımları belirlenir. Buradan,

$$u(x,t) = \lim_{n\to\infty} u_n(x,t)$$

$$= 2\mathrm{sech}t + x\mathrm{tanh}t$$

çözümü bulunur(Chakraverty vd., 2019).

BÖLÜM 4

SCHRÖDİNGER DENKLEMİNİN VARYASYONEL İTERASYON YÖNTEMİ İLE ÇÖZÜMLERİ

Zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\,\psi(x,y,z,t) + \beta|\psi(x,y,z,t)|^2\psi(x,y,z,t)$$

$$t > 0, \quad x, y, z \in \mathbb{R} \tag{4.1}$$

biçimindedir(Pitaevskii ve Stringari, 2003, s.39). Bu denklemde

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Laplace operatörü, β reel bir parametre, m kütle ve $h = 6.626\ 068\ 96\ (33) \times 10^{-34} Js$ Planck sabiti olmak üzere $\hbar = h/2\pi$ 'dir(Serway & Jewett, 2012). $\psi \in L^2$ çözüm fonksiyonu veya dalga fonksiyonu, V potansiyeldir.

Bu bölümün ilk kısmında, lineer Schrödinger denkleminin, ikinci kısmında ise lineer olmayan Schrödinger denkleminin varyasyonel iterasyon yöntemi ile çözümleri incelenmiştir.

4.1. Lineer Schrödinger Denkleminin Varyasyonel İterasyon Yöntemi ile Çözümleri

Bu kısımda, $\beta = 0$ ve $2m = \hbar = 1$ alındığında (4.1) denkleminin özel bir hali olan

$$-i\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t} = \nabla^2\psi(x,y,z,t) - V(x,y,z)\psi(x,y,z,t), \quad t > 0,\ x, y, z \in [0,\infty) \tag{4.1.1}$$

zamana bağlı lineer Schrödinger denklemini

$$\psi(x,y,z,0) = f(x,y,z), \quad x, y, z \in [0,\infty)$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0,y,z,t)=p_0(y,z,t),\, \psi_x(0,y,z,t)=p_1(y,z,t),\quad t>0$$
$$\psi(x,0,z,t)=q_0(x,z,t),\, \psi_y(x,0,z,t)=q_1(x,z,t),\quad t>0 \tag{4.1.2}$$
$$\psi(x,y,0,t)=r_0(x,y,t),\, \psi_z(x,y,0,t)=r_1(x,y,t),\quad t>0$$

sınır koşulları altında varyasyonel iterasyon yöntemi ile ele alacağız(Carinena, Ibort, Marmo ve Morandi, 2015). Burada, $f, p_0, p_1, q_0, q_1, r_0$ ve r_1 bilinen fonksiyonlardır. Varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.1) denkleminin t,x,y ve z yönündeki düzeltme fonksiyonellerini $n\geq 0$ için aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+\int_0^t\lambda_1(\varepsilon)\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2}$$
$$+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2}-V(x,y,z)\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)\Big)d\varepsilon, \tag{4.1.3}$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+\int_0^x\lambda_2(\zeta)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial t}+\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2}$$
$$+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial z^2}-V(\zeta,y,z)\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)\Big)d\zeta, \tag{4.1.4}$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+\int_0^y\lambda_3(\mu)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial t}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial x^2}$$
$$+\frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial\mu^2}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial z^2}-V(x,\mu,z)\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)\Big)d\mu \tag{4.1.5}$$

ve

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+\int_0^z\lambda_4(\varsigma)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(x,y,\varsigma,t)}{\partial t}+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\varsigma,t)}{\partial x^2}$$
$$+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\varsigma,t)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial\varsigma^2}-V(x,y,\varsigma)\widetilde{\psi_n}(x,y,\varsigma,t)\Big)d\varsigma. \tag{4.1.6}$$

λ_1,λ_2,λ_3 ve λ_4 Lagrange çarpanlarının değerlerini bulmak için (4.1.3)-(4.1.6) düzeltme fonksiyonellerinin, $\delta\widetilde{\psi_n}=0$ olacak biçimde varyasyonlarını aldığımızda,

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\delta\psi_n(x,y,z,t)+\delta\int_0^t\lambda_1(\varepsilon)\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\Big)d\varepsilon, \tag{4.1.7}$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\delta\psi_n(x,y,z,t)+\delta\int_0^x\lambda_2(\zeta)\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2}d\zeta, \tag{4.1.8}$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\delta\psi_n(x,y,z,t)+\delta\int_0^y\lambda_3(\mu)\frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial\mu^2}d\mu \tag{4.1.9}$$

ve

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \delta\psi_n(x,y,z,t) + \delta\int_0^z \lambda_4(\varsigma)\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial\varsigma^2}d\varsigma \tag{4.1.10}$$

elde edilir. (4.1.7)-(4.1.10) eşitliklerinde yer alan integrallerde kısmi integrasyon kullandığımızda

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \left(1 + i\lambda_1(\varepsilon)\right)\delta\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=t} - i\int_0^t \lambda_1'(\varepsilon)\delta\psi_n(x,y,z,\varepsilon)d\varepsilon = 0, \tag{4.1.11}$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \left(1 - \lambda_2'(\zeta)\right)\delta\psi_n(\zeta,y,z,t)\Big|_{\zeta=x} + \lambda_2(\zeta)\delta\psi_n'(\zeta,y,z,t)\Big|_{\zeta=x} + \int_0^x \lambda_2''(\zeta)\delta\psi_n(\zeta,y,z,t)\,d\zeta = 0, \tag{4.1.12}$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \left(1 - \lambda_3'(\mu)\right)\delta\psi_n(x,\mu,z,t)\Big|_{\mu=y} + \lambda_3(\mu)\delta\psi_n'(x,\mu,z,t)\Big|_{\mu=y} + \int_0^y \lambda_3''(\mu)\delta\psi_n(x,\mu,z,t)\,d\mu = 0 \tag{4.1.13}$$

ve

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \left(1 - \lambda_4'(\varsigma)\right)\delta\psi_n(x,y,\varsigma,t)\Big|_{\varsigma=z} + \lambda_4(\varsigma)\delta\psi_n'(x,y,\varsigma,t)\Big|_{\varsigma=z} + \int_0^z \lambda_4''(\varsigma)\delta\psi_n(x,y,\varsigma,t)\,d\varsigma = 0 \tag{4.1.14}$$

bulunur. Böylece,

$$1 + i\lambda_1(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=t} = 0,\ \lambda_1'(\varepsilon) = 0, \tag{4.1.15}$$

$$1 - \lambda_2'(\zeta)\Big|_{\zeta=x} = 0,\ \lambda_2(\zeta)\Big|_{\zeta=x} = 0,\ \lambda_2''(\zeta) = 0, \tag{4.1.16}$$

$$1 - \lambda_3'(\mu)\Big|_{\mu=y} = 0,\ \lambda_3(\mu)\Big|_{\mu=y} = 0,\ \lambda_3''(\mu) = 0, \tag{4.1.17}$$

$$1 - \lambda_4'(\varsigma)\Big|_{\varsigma=z} = 0,\ \ \lambda_4(\varsigma)\Big|_{\varsigma=z} = 0,\ \ \lambda_4''(\varsigma) = 0 \tag{4.1.18}$$

koşullarından sırasıyla

$$\lambda_1(\varepsilon) = i,\ \lambda_2(\zeta) = \zeta - x,\ \lambda_3(\mu) = \mu - y,\ \lambda_4(\varsigma) = \varsigma - z \tag{4.1.19}$$

biçiminde belirlenir. (4.1.19) Lagrange çarpanları (4.1.3)-(4.1.6) denklemlerinde yerine yazıldığında iterasyon formülleri $n \geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + i\int_0^t \left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2} - V(x,y,z)\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\right)d\varepsilon, \tag{4.1.20}$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^x (\zeta - x)\Big(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2}$$

$$+\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial z^2} - V(\zeta,y,z)\psi_n(\zeta,y,z,t)\Big)d\zeta, \qquad (4.1.21)$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^y (\mu - y)\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial x^2}$$

$$+\frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial z^2} - V(x,\mu,z)\psi_n(x,\mu,z,t)\Big)d\mu \qquad (4.1.22)$$

ve

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z (\varsigma - z)\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial x^2}$$

$$+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial \varsigma^2} - V(x,y,\varsigma)\psi_n(x,y,\varsigma,t)\Big)d\varsigma \qquad (4.1.23)$$

biçiminde elde edilir. ψ_0 sıfırıncı yaklaşımı, başlangıç veya sınır koşulları kullanılarak seçilebilir. Seçilen ψ_0 yaklaşımı ile başlanılarak, (4.1.1) denkleminin yaklaşık çözümleri (4.1.20)-(4.1.23) iterasyon formülleri kullanarak belirlenir.

Varyasyonel iterasyon yönteminin bir, iki ve üç boyutlu lineer Schrödinger denklemlerinin çözümlerini bulmak için nasıl uygulanacağını örneklerle inceleyelim.

4.1.1. Örnek:

$-i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}, \quad t > 0,\ x \in [0,\infty)$

bir boyutlu lineer Schrödinger denklemini

$V(x) = 0$

potansiyeli ve

$\psi(x,0) = 1 + 2\cosh 2x$

başlangıç koşuluyla birlikte göz önüne alalım(Ramesh Rao, 2016). (4.1.19) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x,t) = \psi_n(x,t) + i\int_0^t \Big(i\frac{\partial\psi(x,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial^2\psi(x,\varepsilon)}{\partial x^2}\Big)d\varepsilon,\ n \geq 0 \qquad (4.1.24)$$

elde edilir.

Başlangıç koşulundan ilk yaklaşım

$\psi_0(x,t) = \psi(x,0) = 1 + 2\cosh 2x$

biçiminde seçilebilir. Seçilen yaklaşım (4.1.24) iterasyon formülünde kullanılarak aşağıdaki yaklaşımlar bulunur:

$\psi_1(x,t) = 1 + 2(1+4it)\cosh 2x,$

$\psi_2(x,t) = 1 + 2\left(1 + 4it + \frac{(4it)^2}{2!}\right)\cosh 2x,$

$\psi_3(x,t) = 1 + 2\left(1 + 4it + \frac{(4it)^2}{2!} + \frac{(4it)^3}{3!}\right)\cosh 2x,$

$\vdots$

$\psi_n(x,t) = 1 + 2\left(1 + \frac{4it}{1!} + \frac{(4it)^2}{2!} + \frac{(4it)^3}{3!} + \frac{(4it)^4}{4!} + \cdots + \frac{(4it)^n}{n!}\right)\cosh 2x.$

Buradan,

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,t)\\ &= 1 + \left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(4it)^n}{n!}\right)2\cosh 2x\\ &= 1 + e^{4it}2\cosh 2x,\end{aligned}$$

çözümü elde edilir.

Bu problemin, Rao'nun (2016) diferansiyel transform yöntemini kullanarak elde ettiği çözümü ile varyasyonel iterasyon yöntemini kullanarak elde edilen çözümü aynıdır.

4.1.2. Örnek:

$-i\frac{\partial\psi(x,y,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial y^2}, \; t>0,\; x,y\in[0,\infty)$

iki boyutlu lineer Schrödinger denklemini

$V(x,y) = 0$

potansiyeli,

$\psi(x,y,0) = \sin x + \sin y$

başlangıç koşulu ve

$$\begin{aligned}&\psi(0,y,t) = \sin y e^{-it}, \; \psi_x(0,y,t) = e^{-it},\\ &\psi(x,0,t) = \sin x e^{-it}, \; \psi_y(x,0,t) = e^{-it},\end{aligned} \tag{4.1.25}$$

sınır koşulları ile birlikte göz önüne alalım(Ghanbari, 2014). (4.1.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + i\int_0^t\left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial y^2}\right)d\varepsilon,\; n\geq 0 \tag{4.1.26}$$

biçiminde olur.

Başlangıç koşulundan,

$$\psi_0(x,y,t) = \psi(x,y,0) = \sin x + \sin y$$

ilk yaklaşım olarak seçilebilir. Seçilen yaklaşım (4.1.26) iterasyon formülünde kullanılarak

$$\psi_1(x,y,t) = (\sin x + \sin y)(1 - it),$$

$$\psi_2(x,y,t) = (\sin x + \sin y)(1 - it + \tfrac{(it)^2}{2!}),$$

$$\psi_3(x,y,t) = (\sin x + \sin y)(1 - it + \tfrac{(it)^2}{2!} - \tfrac{(it)^3}{3!}),$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = (\sin x + \sin y)\left(1 - it + \frac{(it)^2}{2!} - \frac{(it)^3}{3!} + \frac{(it)^4}{4!} + \cdots + \frac{(-it)^n}{n!}\right)$$

yaklaşımları elde edilir. Buradan,

$$\begin{aligned}\psi(x,y,t) &= \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)\\ &= (\sin x + \sin y)\textstyle\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-it)^k}{k!}\\ &= (\sin x + \sin y)e^{-it} \qquad (4.1.27)\end{aligned}$$

çözümü bulunur.

İkinci bir çözüm yolu olarak, x yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.21) iterasyon formülü

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + \int_0^x (\zeta - x)\left(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,y,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,t)}{\partial\zeta^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2}\right)d\zeta,\ \ n \geq 0 \qquad (4.1.28)$$

biçiminde olur. Bu durumda x yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,t) = (a + bx + \sin y)e^{-it} \qquad (4.1.29)$$

seçilebilir. (4.1.29) yaklaşımı (4.1.28) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = (a + bx - a\frac{x^2}{2!} - b\frac{x^3}{3!} + \sin y)e^{-it} \qquad (4.1.30)$$

yaklaşımı elde edilir.(4.1.25) sınır koşullarından $a = 0$ ve $b = 1$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,t) = (x + \sin y)e^{-it},$$

$$\psi_1(x,y,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \sin y\right)e^{-it}$$

olur. Böylece, bulunan ψ_0, ψ_1 yaklaşımlarını ve (4.1.28) iterasyon formülünü kullanarak x yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,y,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \sin y\right) e^{-it},$$

$$\psi_3(x,y,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \sin y\right) e^{-it},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = \left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} + \sin y\right) e^{-it}.$$

Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)$$

hesaplandığında (4.1.27) çözümü bulunur.

Üçüncü bir çözüm yolu olarak, bu problemin yaklaşık çözümleri iterasyon formülü kullanılarak y yönünde de araştırılabilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) iterasyon formülü $n \geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + \int_0^y (\mu - y)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,\mu,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial \mu^2}\right) d\mu \tag{4.1.31}$$

biçiminde olur. Bu durumda y yönünde sıfırıncı yaklaşım, c ve d sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,t) = (c + dy + \sin x)e^{-it} \tag{4.1.32}$$

seçilebilir. (4.1.32) yaklaşımı (4.1.31) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = \left(c + dy - c\frac{y^2}{2!} - d\frac{y^3}{3!} + \sin x\right)e^{-it} \tag{4.1.33}$$

yaklaşımı elde edilir.(4.1.25) sınır koşullarından $c = 0$ ve $d = 1$ bulunur. Buna göre,

$$\psi_0(x,y,t) = (y + \sin x)e^{-it},$$

$$\psi_1(x,y,t) = \left(y - \frac{y^3}{3!} + \sin x\right) e^{-it}$$

olur. Böylece, bulunan ψ_0, ψ_1 yaklaşımları ve (4.1.31) iterasyon formülünü kullanarak y yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,y,t) = \left(y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!} + \sin x\right) e^{-it},$$

$$\psi_3(x,y,t) = \left(y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!} - \frac{y^7}{7!} + \sin x\right) e^{-it},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = \left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{y^{2k+1}}{(2k+1)!} + \sin x\right) e^{-it}.$$

Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)$$

hesaplandığında (4.1.27) çözümü bulunur.

Varyasyonel iterasyon yöntemiyle elde edilen bu çözüm, Ghanbari'nin (2014) homotopy yöntemini ve Mohebbi'nin (2009) kompakt sınır değer yöntemini kullanarak elde ettiği çözümün aynısıdır.

4.1.3. Örnek:

$$-i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}, \; t > 0,\; x,y \in [0,\infty)$$

iki boyutlu lineer Schrödinger denklemini

$$V(x,y) = 0$$

potansiyeli,

$$\psi(x,y,0) = e^{i(x+y)}$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0,y,t) = e^{i(y-2t)},\; \psi_x(0,y,t) = ie^{i(y-2t)},$$
$$\psi(x,0,t) = e^{i(x-2t)},\; \psi_y(x,0,t) = ie^{i(x-2t)} \qquad (4.1.34)$$

sınır koşulları ile birlikte göz önüne alalım(Dehghan ve Mirzaei, 2008). (4.1.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + i\int_0^t \left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial y^2} \right) d\varepsilon,\; n \geq 0 \qquad (4.1.35)$$

biçiminde olur.

İlk yaklaşım, başlangıç koşulundan,

$$\psi_0(x,y,t) = \psi(x,y,0) = e^{i(x+y)}$$

olarak seçilebilir. Seçilen yaklaşım (4.1.35) iterasyon formülünde kullanılarak

$$\psi_1(x,y,t) = e^{i(x+y)}(1-2it),$$

$$\psi_2(x,y,t) = e^{i(x+y)}\left(1-2it+\frac{(-2it)^2}{2!}\right),$$

$\psi_3(x,y,t) = e^{i(x+y)}(1 - 2it + \frac{(-2it)^2}{2!} + \frac{(-2it)^3}{3!}),$

$\vdots$

$\psi_n(x,y,t) = e^{i(x+y)}\left(1 - 2it + \frac{(-2it)^2}{2!} + \frac{(-2it)^3}{3!} + \frac{(-2it)^4}{4!} + \cdots + \frac{(-2it)^n}{n!}\right)$

yaklaşımları elde edilir. Buradan,

$$\begin{aligned}\psi(x,y,t) &= \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)\\ &= e^{i(x+y)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-2it)^k}{k!}\\ &= e^{i(x+y-2t)} \qquad (4.1.36)\end{aligned}$$

çözümü bulunur.

İkinci bir çözüm yolu olarak, x yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu durumda, varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.21) iterasyon formülü

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + \int_0^x (\zeta - x)\left(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,y,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,t)}{\partial\zeta^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2}\right)d\zeta,\ n \geq 0 \qquad (4.1.37)$$

biçimindir. x yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,t) = e^{i(y-2t)}(a + bx) \qquad (4.1.38)$$

seçilebilir. (4.1.38) yaklaşımı (4.1.37) iterasyon formülünde kullanılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = e^{i(y-2t)}\left(a + bx - \frac{ax^2}{2!} - \frac{bx^3}{3!}\right) \qquad (4.1.39)$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.34) sınır koşullarından $a = 1$ ve $b = i$ bulunur. Bu durumda,

$\psi_0(x,y,t) = e^{i(y-2t)}(1 + ix),$

$\psi_1(x,y,t) = e^{i(y-2t)}\left(1 + ix - \frac{x^2}{2!} - \frac{ix^3}{3!}\right)$

olur. ψ_1 yaklaşımı ve x yönündeki (4.1.37) iterasyon formülünü kullanarak

$\psi_2(x,y,t) = e^{i(y-2t)} \sum_{k=0}^{5} \frac{(ix)^k}{k!},$

$\psi_3(x,y,t) = e^{i(y-2t)} \sum_{k=0}^{7} \frac{(ix)^k}{k!},$

$\vdots$

$\psi_n(x,y,t) = e^{i(y-2t)} \sum_{k=0}^{2n+1} \frac{(ix)^k}{k!}$

yaklaşımları bulunur. Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)$$

hesaplandığında (4.1.36) çözümü bulunur.

Üçüncü bir çözüm yolu olarak, bu problemin yaklaşık çözümleri iterasyon formülü kullanılarak y yönünde de araştırılabilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) iterasyon formülü $n \geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + \int_0^y (\mu - y)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,\mu,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial \mu^2}\right)d\mu \tag{4.1.40}$$

biçiminde olur. Bu durumda y yönünde sıfırıncı yaklaşım, c ve d sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,t) = e^{i(x-2t)}(c+dy) \tag{4.1.41}$$

seçilebilir. (4.1.41) yaklaşımı (4.1.40) iterasyon formülünde kullanılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = e^{i(x-2t)}\left(c + dy - \frac{cy^2}{2!} - \frac{dy^3}{3!}\right) \tag{4.1.42}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.34) sınır koşullarından $c = 1$ ve $d = i$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,t) = e^{i(x-2t)}(1+iy),$$

$$\psi_1(x,y,t) = e^{i(x-2t)}\left(1 + iy - \frac{y^2}{2!} - \frac{iy^3}{3!}\right)$$

olur. ψ_1 yaklaşımı ve x yönündeki (4.1.37) iterasyon formülünü kullanarak

$$\psi_2(x,y,t) = e^{i(x-2t)}\sum_{k=0}^{5}\frac{(iy)^k}{k!},$$

$$\psi_3(x,y,t) = e^{i(x-2t)}\sum_{k=0}^{7}\frac{(iy)^k}{k!},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = e^{i(x-2t)}\sum_{k=0}^{2n+1}\frac{(iy)^k}{k!}$$

elde edilir. Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,t)$$

hesaplandığında (4.1.36) çözümü bulunur.

Bu problemin varyasyonel iterasyon yöntemini kullanarak elde edilen çözümü, Dehghan ve Mirzaei’nin (2008) ağsız yerel sınır integral denklem yöntemini kullanarak elde ettiği çözüm ile aynıdır.

4.1.4. Örnek:

$$-i\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi_n}{\partial z^2},\qquad t>0,\quad x,y,z\in[0,2\pi],$$

üç boyutlu lineer Schrödinger denklemini,

$$V(x,y,z)=0$$

potansiyeli,

$$\psi(x,y,z,0)=\sin x\sin y\sin z \tag{4.1.43}$$

başlangıç koşulu ve

$$\begin{aligned}&\psi(0,y,z,t)=0\ ,\ \psi_x(0,y,z,t)=\sin y\sin z\, e^{-3it},\\&\psi(x,0,z,t)=0\ ,\ \psi_y(x,0,z,t)=\sin x\sin z\, e^{-3it},\\&\psi(x,y,0,t)=0\ ,\ \psi_z(x,y,0,t)=\sin x\sin y\, e^{-3it}\end{aligned} \tag{4.1.44}$$

sınır koşulları ile çözelim(Eskar, Huang & Feng, 2018). Varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+i\int_0^t\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2}\\+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2}\Big)d\varepsilon,\ n\geq 0\end{aligned} \tag{4.1.45}$$

biçiminde olur.

Başlangıç koşulundan, sıfırıncı yaklaşım

$$\psi_0(x,y,z,t)=\psi(x,y,z,0)=\sin x\sin y\sin z$$

biçiminde seçilebilir. Seçilen bu yaklaşım (4.1.45) iterasyon formülünde kullanıldığında

$$\psi_1(x,y,z,t)=\sin x\sin y\ \sin z\,(1-3it),$$

$$\psi_2(x,y,z,t)=\sin x\sin y\ \sin z\left(1-3it-\frac{9t^2}{2!}\right),$$

$$\psi_3(x,y,z,t)=\sin x\sin y\ \sin z\left(1-3it-\frac{9t^2}{2!}+\frac{9it^3}{2}\right),$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,z,t)=\sin x\sin y\ \sin z\sum_{k=0}^{n}\frac{(-3it)^k}{k!}$$

yaklaşımları bulunur. Buradan, varyasyonel iterasyon yöntemine göre verilen üç boyutlu lineer Schrödinger denklemi için

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z,t)&=\lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)\\&=\sin x\sin y\ \sin z\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-3it)^k}{k!}\\&=\sin x\sin y\ \sin z\, e^{-3it}\end{aligned} \tag{4.1.46}$$

çözümü elde edilir.

Bu problemde varyasyonel iterasyon yöntemiyle elde ettiğimiz çözüm Eskar, vd'in (2018) sonlu fark yöntemi ile elde ettiği çözümün aynısıdır.

Ayrıca, ikinci bir çözüm yolu olarak, x yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.21) iterasyon formülü

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^x (\zeta - x)\left(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial z^2}\right)d\zeta,\ n \geq 0 \tag{4.1.47}$$

biçiminde olur. Bu durumda x yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin y \sin z\,(a + bx)e^{-3it} \tag{4.1.48}$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.48) yaklaşımı (4.1.47) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin y \sin z\,(a + bx - a\frac{x^2}{2!} - b\frac{x^3}{3!})e^{-3it} \tag{4.1.49}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.44) sınır koşullarından $a = 0$ ve $b = 1$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin y \sin z\, xe^{-3it},$$

$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin y \sin z\left(x - \frac{x^3}{3!}\right)e^{-3it}$$

olur. Böylece, bulunan ψ_0, ψ_1 yaklaşımları ve (4.1.47) iterasyon formülünü kullanarak x yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,y,z,t) = \sin y \sin z\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!}\right)e^{-3it},$$

$$\psi_3(x,y,z,t) = \sin y \sin z\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!}\right)e^{-3it},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,z,t) = \sin y \sin z\left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)e^{-3it}.$$

Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)$$

hesaplandığında (4.1.46) çözümü bulunur.

Üçüncü bir çözüm yolu olarak, bu problemin yaklaşık çözümleri iterasyon formülü kullanılarak y yönünde de araştırılabilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) iterasyon formülü

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^y (\mu - y)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial z^2}\right) d\mu,\ n \geq 0 \tag{4.1.50}$$

olur. Bu durumda y yönünde, sıfırıncı yaklaşım, c ve d sabitler olmak üzere

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x \sin z\,(c + dy)e^{-3it} \tag{4.1.51}$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.51) yaklaşımı (4.1.50) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin x \sin z\,(c + dy - c\frac{y^2}{2!} - d\frac{y^3}{3!})e^{-3it} \tag{4.1.52}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.44) sınır koşullarından $c = 0$ ve $d = 1$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x \sin z\, ye^{-3it},$$

$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin x \sin z\,(y - \frac{y^3}{3!})e^{-3it}$$

olur. Böylece, (4.1.50) iterasyon formülünden y yönündeki yaklaşımlar aşağıdaki gibidir:

$$\psi_2(x,y,z,t) = \sin x \sin z\,(y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!})e^{-3it}\ ,$$

$$\psi_3(x,y,z,t) = \sin x \sin z\,(y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!} - \frac{y^7}{7!})e^{-3it}\ ,$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,z,t) = \sin x \sin z\left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{y^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)e^{-3it}.$$

Bulunan yaklaşımlar kullanılarak,

$$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,z,t)$$

hesaplandığında (4.1.46) çözümü bulunur.

Dördüncü bir çözüm yolu olarak, z yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) kullanıldığında

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z (\varsigma - z)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial \varsigma^2}\right) d\varsigma,\ n \geq 0 \tag{4.1.53}$$

biçiminde z yönündeki iterasyon formülü olur. Bu durumda z yönünde sıfırıncı yaklaşım, g ve h sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x \sin y\,(g + hz)e^{-3it} \tag{4.1.54}$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.54) yaklaşımı (4.1.53) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin x \sin y\,(g + hz - g\frac{z^2}{2!} - h\frac{z^3}{3!})e^{-3it} \quad (4.1.55)$$

yaklaşımı elde edilir. Sınır koşullarından $g = 0$ ve $h = 1$ bulunur. Bu durumda,

$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x \sin y\, ze^{-3it}$,

$\psi_1(x,y,z,t) = \sin x \sin y\,(z - \frac{z^3}{3!})e^{-3it}$

bulunur. Böylece, (4.1.53) iterasyon formülünü kullandığımızda

$\psi_2(x,y,z,t) = \sin x \sin y\,(z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!})e^{-3it}$,

$\psi_3(x,y,z,t) = \sin x \sin y\,(z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \frac{z^7}{7!})e^{-3it}$,

$\vdots$

$\psi_n(x,y,z,t) = \sin x \sin y\left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{z^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)e^{-3it}$

yaklaşımlarını elde ederiz. Bulunan bu yaklaşımlar için

$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,z,t)$

hesaplandığında (4.1.46) çözümü elde edilir. Böylece, farklı yönlerdeki iterasyon formülleri kullanılarak elde edilen sonuçların aynı olduğu görülmektedir.

4.1.5. Örnek:

$-i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n}{\partial z^2}, \qquad t > 0, \quad x,y,z \in [0,\infty),$

üç boyutlu lineer Schrödinger denklemini,

$V(x,y,z) = 0$

potansiyeli,

$$\psi(x,y,z,0) = \sin x + \sin y + \sin z \quad (4.1.56)$$

başlangıç koşulu ve

$$\begin{aligned} &\psi(0,y,z,t) = (\sin y + \sin z)e^{-it}\,, \psi_x(0,y,z,t) = e^{-it},\\ &\psi(x,0,z,t) = (\sin x + \sin z)e^{-it}\,, \psi_y(x,0,z,t) = e^{-it}, \quad (4.1.57)\\ &\psi(x,y,0,t) = (\sin x + \sin y)e^{-it}\,, \psi_z(x,y,0,t) = e^{-it} \end{aligned}$$

sınır koşulları ile çözelim. Varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + i\int_0^t \left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2}\right.$$
$$\left. + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2}\right)d\varepsilon,\; n \geq 0 \quad (4.1.58)$$

biçiminde olur.

Başlangıç koşulundan, sıfırıncı yaklaşım

$\psi_0(x,y,z,t) = \psi(x,y,z,0) = \sin x + \sin y + \sin z$

biçiminde seçilebilir. ψ_0 yaklaşımı (4.1.58) iterasyon formülünde kullanıldığında

$\psi_1(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + \sin z)(1 - it),$

$\psi_2(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + \sin z)\left(1 - it + \frac{(-it)^2}{2!}\right),$

$\psi_3(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + \sin z)\left(1 - it + \frac{(-it)^2}{2!} + \frac{(-it)^3}{3!}\right),$

$\vdots$

$\psi_n(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + \sin z)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-3it)^k}{k!}$

yaklaşımları bulunur. Buradan, varyasyonel iterasyon yöntemine göre verilen üç boyutlu lineer Schrödinger denklemi için

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z,t) &= \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)\\ &= (\sin x + \sin y + \sin z)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-it)^k}{k!}\\ &= (\sin x + \sin y + \sin z)e^{-it} \qquad (4.1.59)\end{aligned}$$

çözümü elde edilir.

Ayrıca, ikinci bir çözüm yolu olarak, x yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.21) iterasyon formülü

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^x(\zeta - x)\Big(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2} + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2}\\ + \frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial z^2}\Big)d\zeta,\ n \geq 0 \qquad (4.1.60)\end{aligned}$$

biçiminde olur. Bu durumda x yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,z,t) = (a + bx + \sin y + \sin z)e^{-it} \qquad (4.1.61)$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.61) yaklaşımı (4.1.60) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \left(a + bx - \frac{ax^2}{2!} - \frac{bx^3}{3!} + \sin y + \sin z\right)e^{-it} \qquad (4.1.62)$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.57) sınır koşullarından $a = 0$ ve $b = 1$ bulunur. Bu durumda,

$\psi_0(x,y,z,t) = (x + \sin y + \sin z)e^{-it},$

$\psi_1(x,y,z,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \sin y + \sin z\right)e^{-it}$

bulunur. ψ_1 yaklaşımları ve (4.1.60) iterasyon formülünü kullanarak x yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,y,z,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \sin y + \sin z\right) e^{-it},$$

$$\psi_3(x,y,z,t) = \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \sin y + \sin z\right) e^{-it},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,z,t) = \left(\left(\sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!}\right) + \sin y + \sin z\right) e^{-it}.$$

Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,z,t)$$

hesaplandığında (4.1.59) çözümü bulunur.

Üçüncü bir çözüm yolu olarak, bu problemin yaklaşık çözümleri iterasyon formülü kullanılarak y yönünde de araştırılabilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) iterasyon formülü

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^y (\mu - y)\left(i\frac{\partial \psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2 \psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial z^2}\right) d\mu,\ n \geq 0 \tag{4.1.63}$$

olur. Bu durumda y yönünde, sıfırıncı yaklaşım, c ve d sabitler olmak üzere

$$\psi_0(x,y,z,t) = (\sin x + \sin z + c + dy)e^{-it} \tag{4.1.64}$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.64) yaklaşımı (4.1.63) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin z + c + dy - \frac{cy^2}{2!} - \frac{dy^3}{3!}\right) e^{-it} \tag{4.1.65}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.1.35) sınır koşullarından $c = 0$ ve $d = 1$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,z,t) = (\sin x + \sin z + y)e^{-it},$$

$$\psi_1(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin z + y - \frac{y^3}{3!}\right) e^{-it}$$

olur. Böylece, (4.1.63) iterasyon formülünden y yönündeki yaklaşımlar aşağıdaki gibidir:

$$\psi_2(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin z + y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!}\right) e^{-it},$$

$$\psi_3(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin z + y - \frac{y^3}{3!} + \frac{y^5}{5!} - \frac{y^7}{7!}\right) e^{-it},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin z + \left(\sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{y^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)\right) e^{-it}.$$

Bulunan yaklaşımlar kullanılarak,

$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,z,t)$

hesaplandığında (4.1.59) çözümü bulunur.

Dördüncü bir çözüm yolu olarak, z yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.1.23) kullanıldığında

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z (\varsigma - z)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial \varsigma^2}\right) d\varsigma,\ n \geq 0 \tag{4.1.66}$$

biçiminde z yönündeki iterasyon formülü olur. Bu durumda z yönünde sıfırıncı yaklaşım, g ve h sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + g + hz)e^{-it} \tag{4.1.67}$$

biçiminde seçilebilir. (4.1.67) yaklaşımı (4.1.66) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin y + g + hz - \frac{gz^2}{2!} - \frac{hz^3}{3!}\right)e^{-it} \tag{4.1.68}$$

yaklaşımı elde edilir. Sınır koşullarından $g = 0$ ve $h = 1$ bulunur. Bu durumda,

$\psi_0(x,y,z,t) = (\sin x + \sin y + z)e^{-it}$,

$\psi_1(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin y + z - \frac{z^3}{3!}\right)e^{-it}$

bulunur. Böylece, (4.1.44) iterasyon formülünü kullandığımızda

$\psi_2(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin y + z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!}\right)e^{-it}$,

$\psi_3(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin y + z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \frac{z^7}{7!}\right)e^{-it}$,

$\vdots$

$\psi_n(x,y,z,t) = \left(\sin x + \sin y + \left(\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{z^{2k+1}}{(2k+1)!}\right)\right)e^{-it}$

yaklaşımlarını elde ederiz. Bulunan bu yaklaşımlar için

$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty} \psi_n(x,y,z,t)$

hesaplandığında (4.1.59) çözümü elde edilir. Farklı yönlerdeki iterasyon formülleri kullanılarak aynı sonuçlar elde edilmiştir.

Sonuç olarak, varyasyonel iterasyon yöntemi ile çözülen örneklerde yaklaşık çözümler, kullanılan iterasyon formülünün tanımlandığı yöne bağlı değildir. Varyasyonel iterasyon yöntemi her yönde doğru ve hızlı yaklaşımlar verir. Bu da yöntemin ne kadar etkili olduğunu göstermektedir.

4.2. Lineer Olmayan Schrödinger Denkleminin Varyasyonel İterasyon Yöntemi ile Çözümleri

Bu kısımda, (4.1) denkleminde $m = \hbar = 1$ olarak alındığında elde edilen

$$i\frac{\partial \psi(x,y,z,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi(x,y,z,t) + V(x,y,z)\,\psi(x,y,z,t) + \beta|\psi(x,y,z,t)|^2\psi(x,y,z,t),$$

$t > 0$, $x, y, z \in [0, \infty)$,

(4.2.1) zamana bağlı lineer olmayan Schrödinger denklemini

$$\psi(x,y,z,0) = g(x,y,z),\ x,y,z \in [0,\infty) \tag{4.2.2}$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0,y,z,t) = p_0(y,z,t),\ \psi_x(0,y,z,t) = p_1(y,z,t),\quad t > 0$$

$$\psi(x,0,z,t) = q_0(x,z,t),\ \psi_y(x,0,z,t) = q_1(x,z,t),\quad t > 0$$

$$\psi(x,y,0,t) = r_0(x,y,t),\ \psi_z(x,y,0,t) = r_1(x,y,t),\quad t > 0$$

sınır koşulları altında varyasyonel iterasyon yöntemi ile inceleyeceğiz(Schultz ve Vrakking, 2014). Burada, g, p_0, p_1, q_0, q_1, r_0 ve r_1 bilinen fonksiyonlardır. (4.2.1) denkleminin t, x, y ve z yönündeki düzeltme fonksiyonellerini $n \geq 0$ için aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^t \lambda_1(\varepsilon)\Big(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2}$$
$$+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2}\Big) - V(x,y,z)\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon) - \beta\left|\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)\right|^2\widetilde{\psi_n}(x,y,z,\varepsilon)\Big)\,d\varepsilon, \tag{4.2.3}$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^x \lambda_2(\zeta)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial \zeta^2} + \frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial y^2}$$
$$+\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)}{\partial z^2}\Big) - V(\zeta,y,z)\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t) - \beta\left|\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)\right|^2\widetilde{\psi_n}(\zeta,y,z,t)\Big)\,d\zeta \tag{4.2.4}$$

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^y \lambda_3(\mu)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial x^2}$$

$$+\frac{\partial^2\psi(x,\mu,z,t)}{\partial\mu^2} + \frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)}{\partial z^2}\Big) - V(x,\mu,z)\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t) - \beta\left|\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)\right|^2\widetilde{\psi_n}(x,\mu,z,t)\Big)\,d\mu$$

(4.2.5)

ve

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z \lambda_4(\tau)\Big(i\frac{\partial\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)}{\partial y^2}$$

$$+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\tau,t)}{\partial\tau^2}\Big) - V(x,y,\tau)\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t) - \beta\left|\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)\right|^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)\Big)\,d\tau. \quad (4.2.6)$$

Buradan, (4.2.3)-(4.2.6) denklemlerinin her iki tarafının $\delta\widetilde{\psi_n} = 0$ olacak biçimde varyasyonunu aldığımızda,

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \delta\psi_n(x,y,z,t) + \delta\int_0^t i\lambda_1(\varepsilon)\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\,d\varepsilon, \quad (4.2.7)$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \delta\psi_n(x,y,z,t) + \delta\int_0^x \frac{1}{2}\lambda_2(\zeta)\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial\zeta^2}\,d\zeta, \quad (4.2.8)$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \delta\psi_n(x,y,z,t) + \delta\int_0^y \frac{1}{2}\lambda_3(\mu)\frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial\mu^2}\,d\mu \quad (4.2.9)$$

ve

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \delta\psi_n(x,y,z,t) + \delta\int_0^z \frac{1}{2}\lambda_4(\tau)\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\tau,t)}{\partial\tau^2}\,d\tau \quad (4.2.10)$$

elde edilir. (4.2.7)-(4.2.10) eşitliklerinde yer alan integraller için kısmi integrasyon kullandığımızda

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \big(1 + i\lambda_1(\varepsilon)\big)\,\delta\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=t} - i\int_0^t \lambda_1'(\varepsilon)\delta\psi_n(x,y,z,\varepsilon)d\varepsilon = 0,$$

(4.2.11)

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \Big(1 - \frac{1}{2}\lambda_2'(\zeta)\Big)\delta\psi_n(\zeta,y,z,t)\Big|_{\zeta=x} + \frac{1}{2}\lambda_2(\zeta)\delta\psi_n'(\zeta,y,z,t)\Big|_{\zeta=x}$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^x \lambda_2''(\zeta)\delta\psi_n(\zeta,y,z,t)\,d\zeta = 0, \quad (4.2.12)$$

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \Big(1 - \frac{1}{2}\lambda_3'(\mu)\Big)\delta\psi_n(x,\mu,z,t)\Big|_{\mu=y}$$

$$+\frac{1}{2}\lambda_3(\mu)\delta\psi_n'(x,\mu,z,t)|_{\mu=y} + \frac{1}{2}\int_0^y \lambda_3''(\mu)\delta\psi_n(x,\mu,z,t)\,d\mu = 0$$

(4.2.13)

ve

$$\delta\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \Big(1 - \frac{1}{2}\lambda_4'(\tau)\Big)\delta\psi_n(x,y,\tau,t)\Big|_{\tau=z} + \frac{1}{2}\lambda_4(\tau)\delta\psi_n'(x,y,\tau,t)\Big|_{\tau=z}$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^z \lambda_4''(\tau)\delta\psi_n(x,y,\tau,t)\,d\tau = 0 \quad (4.2.14)$$

elde edilir. Böylece,

$$\left(1 + i\lambda_1(\varepsilon)\right)\Big|_{\varepsilon=t} = 0,\ \lambda_1'(\varepsilon) = 0, \tag{4.2.15}$$

$$\left(1 - \tfrac{1}{2}\lambda_2'(\zeta)\right)\Big|_{\zeta=x} = 0,\ \tfrac{1}{2}\lambda_2(\zeta)\Big|_{\zeta=x} = 0,\ \ \tfrac{1}{2}\lambda_2''(\zeta) = 0, \tag{4.2.16}$$

$$\left(1 - \tfrac{1}{2}\lambda_3'(\mu)\right)\Big|_{\mu=y} = 0, \tfrac{1}{2}\lambda_3(\mu)|_{\mu=y} = 0,\ \ \tfrac{1}{2}\lambda_3''(\mu) = 0, \tag{4.2.17}$$

$$\left(1 - \tfrac{1}{2}\lambda_4'(\tau)\right)\Big|_{\tau=z} = 0,\ \tfrac{1}{2}\lambda_4(\tau)\Big|_{\tau=z} = 0,\ \ \tfrac{1}{2}\lambda_4''(\tau) = 0 \tag{4.2.18}$$

koşullarından

$$\lambda_1(\varepsilon) = i,\ \lambda_2(\zeta) = 2\zeta - 2x,\ \lambda_3(\mu) = 2\mu - 2y,\ \lambda_4(\tau) = 2\tau - 2z \tag{4.2.19}$$

biçiminde belirlenir. Bulunan Lagrange çarpanları (4.2.3)-(4.2.6) denklemlerinde kullanıldığında iterasyon formülleri $n \geq 0$ için

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + i\int_0^t \Big(i\,\tfrac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \tfrac{1}{2}\nabla^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\\ -V(x,y,z)\psi_n(x,y,z,\varepsilon) - \beta|\psi_n(x,y,z,\varepsilon)|^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\Big)d\varepsilon,\end{aligned} \tag{4.2.20}$$

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^x (2\zeta - 2x)\Big(i\,\tfrac{\partial\psi_n(\zeta,y,z,t)}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\nabla^2\psi_n(\zeta,y,z,t)\\ -V(\zeta,y,z)\psi_n(\zeta,y,z,t) - \beta|\psi_n(\zeta,y,z,t)|^2\psi_n(\zeta,y,z,t)\Big)d\zeta,\end{aligned} \tag{4.2.21}$$

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^y (2\mu - 2y)\Big(i\,\tfrac{\partial\psi_n(x,\mu,z,t)}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\nabla^2\psi_n(x,\mu,z,t)\\ -V(x,\mu,z)\psi_n(x,\mu,z,t) - \beta|\psi_n(x,\mu,z,t)|^2\psi_n(x,\mu,z,t)\Big)d\mu\end{aligned} \tag{4.2.22}$$

ve

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z (2\tau - 2z)\Big(i\,\tfrac{\partial\psi_n(x,y,\tau,t)}{\partial t} + \tfrac{1}{2}\nabla^2\widetilde{\psi_n}(x,y,\tau,t)\\ -V(x,y,\tau)\psi_n(x,y,\tau,t) - \beta|\psi_n(x,y,\tau,t)|^2\psi_n(x,y,\tau,t)\Big)d\tau\end{aligned} \tag{4.2.23}$$

olarak bulunur. ψ_0 sıfırıncı yaklaşımı, başlangıç veya sınır koşulları kullanılarak seçilebilir. Seçilen ψ_0 sıfırıncı yaklaşımı ile başlayarak, (4.2.1) denkleminin yaklaşık çözümleri (4.2.20)-(4.2.23) iterasyon formülleri kullanılarak belirlenir.

Varyasyonel iterasyon yönteminin bir, iki ve üç boyutlu lineer olmayan Schrödinger denklemlerinin çözümlerini bulmak için nasıl uygulanacağını örneklerle ele alalım.

4.2.1. Örnek:

$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - |\psi|^2\psi, \quad t > 0, \quad x \in [0, \infty)$

bir boyutlu lineer olmayan Schrödinger denklemini

$V(x) = 0$

potansiyeli,

$$\psi(x, 0) = e^{ix} \tag{4.2.24}$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0, t) = e^{it/2}\ , \psi_x(0, t) = ie^{it/2} \tag{4.2.25}$$

sınır koşulları ile birlikte göz önüne alalım (Hosseinzadeh, 2017). (4.2.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x, t) = \psi_n(x, t) + i\int_0^t \left(i\frac{\partial\psi_n(x,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi_n(x,\varepsilon)}{\partial x^2} + |\psi_n(x, \varepsilon)|^2\psi_n(x, \varepsilon)\right)d\varepsilon, n \geq 0 \tag{4.2.26}$$

biçiminde olur.

t yönünde,

$\psi_0(x, t) = \psi(x, 0) = e^{ix}$

sıfırıncı yaklaşım olarak seçilebilir. Seçilen yaklaşım (4.2.26) iterasyon formülünde yazılarak

$\psi_1(x, t) = e^{ix}\left(1 + \frac{it}{2}\right),$

$\psi_2(x, t) = e^{ix}\left(1 + \frac{it}{2} - \frac{t^2}{8} + \frac{it^3}{12} - \frac{t^4}{32}\right),$

$\psi_3(x, t) = e^{ix}\left(1 + \frac{it}{2} - \frac{t^2}{8} - \frac{it^3}{48} - \frac{t^4}{96} + \cdots\right),$

$\vdots$

$\psi_n(x, t) = e^{ix}\left(1 + \frac{1}{1!}\left(\frac{it}{2}\right) + \frac{1}{2!}\left(\frac{it}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{it}{2}\right)^3 + \cdots\right).$

yaklaşımları bulunur. Buradan,

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \lim_{n\to\infty}\psi_n(x, t)\\ &= e^{ix}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{it}{2}\right)^n\\ &= e^{i(x+\frac{t}{2})}\end{aligned} \tag{4.2.27}$$

çözümdür(Hosseinzadeh, 2017).

Bu problemin yaklaşık çözümleri varyasyonel iterasyon yöntemine göre ikinci bir çözüm yolu olarak x yönünde de araştırılabilir. Bu problemin x yönündeki (4.2.21) iterasyon formülü $n \geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,t) = \psi_n(x,t) + \int_0^x (2\zeta - 2x)\left(i\frac{\partial\psi_n(\zeta,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi_n(\zeta,t)}{\partial\zeta^2} + |\psi_n(\zeta,t)|^2\psi_n(\zeta,t)\right)d\zeta, \tag{4.2.28}$$

biçiminde bulunur. Bu durumda x yönünde, sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,t) = (a+bx)e^{it/2} \tag{4.2.29}$$

biçiminde seçilebilir. (4.2.29) yaklaşımı (4.2.28) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,t) = \left(a + bx - \frac{ax^2(2a^2-1)}{2} - \frac{bx^3(6a^2-1)}{6} - \frac{ab^2x^4}{2} - \frac{b^3x^5}{10}\right)e^{it/2} \tag{4.2.30}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.2.25) sınır koşullarından $a = 1$ ve $b = i$ bulunur. Bu durumda,

$$\psi_0(x,t) = (1+ix)e^{it/2},$$

$$\psi_1(x,t) = \left(1 + ix - \frac{(ix)^2}{2!} - \frac{(ix)^3}{3!} + \frac{(ix)^4}{6} + \frac{(ix)^5}{10}\right)e^{it/2}$$

olur. Böylece, bulunan ψ_0, ψ_1 yaklaşımları ve (4.2.28) iterasyon formülünü kullanarak x yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,t) = \left(1 + ix + \frac{(ix)^2}{2} + \frac{5(ix)^3}{6} + \frac{(ix)^4}{2} + \frac{(ix)^5}{10} + \cdots\right)e^{it/2},$$

$$\psi_3(x,t) = \left(1 + ix - x^2 - ix^3 + \frac{(ix)^4}{2} + \frac{3(ix)^5}{10} + \frac{17(ix)^6}{90} + \frac{77(ix)^7}{1260} + \cdots\right)e^{it/2},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,t) = \left(1 + ix + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \frac{(ix)^4}{4!} + \frac{3(ix)^5}{10} + \frac{17(ix)^6}{90} + \cdots\right)e^{it/2}.$$

Buradan,

$$\psi(x,t) = \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,t)$$

hesaplandığında (4.2.27) çözümü bulunur. Her iki çözüm yolu sonucunda aynı sonuçların elde edildiği görülmektedir.

4.2.2. Örnek:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right) - 2|\psi|^2\psi, \quad t > 0,\ x, y \in [0,\infty)$$

iki boyutlu lineer olmayan Schrödinger denklemini

$$V(x,y) = 0$$

potansiyeli,

$$\psi(x,y,0) = e^{i(x+y)} \tag{4.2.31}$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0,y,t) = e^{i(y+t)}\ ,\ \psi_x(x,0,t) = ie^{i(y+t)}$$

$$\psi(x,0,t) = e^{i(x+t)}\ ,\ \psi_y(x,0,t) = ie^{i(x+t)} \tag{4.2.32}$$

sınır koşulları ile çözelim(Jazbi, 2009). He'nin varyasyonel iterasyon yöntemine göre, (4.2.20) iterasyon formülü, verilen Schrödinger denklemi için

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + i\int_0^t \left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial\varepsilon} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varepsilon)}{\partial y^2}\right)\right.$$

$$\left. +2|\psi_n(x,y,\varepsilon)|^2\psi_n(x,y,\varepsilon)\right)d\varepsilon,\ n \geq 0 \tag{4.2.33}$$

biçiminde elde edilir.

(4.2.31) başlangıç koşulundan, ilk yaklaşım

$$\psi_0(x,y,t) = \psi(x,y,0) = e^{i(x+y)}$$

olarak seçilir ve (4.2.33) iterasyon formülünde kullanılırsa

$$\psi_1(x,y,t) = (1+it)e^{i(x+y)},$$

$$\psi_2(x,y,t) = \left(1+it+\frac{(it)^2}{2!}+\cdots\right)e^{i(x+y)},$$

$$\psi_3(x,y,t) = \left(1+it+\frac{(it)^2}{2!}+\frac{(it)^3}{3!}+\cdots\right)e^{i(x+y)},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = \left(1+it+\frac{(it)^2}{2!}+\frac{(it)^3}{3!}+\cdots+\frac{(it)^n}{n!}+\cdots\right)e^{i(x+y)}$$

yaklaşımları bulunur. Buradan,

$$\begin{aligned}\psi(x,y,t) &= \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,t)\\ &= e^{i(x+y)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(it)^n}{n!}\\ &= e^{i(x+y+t)}\end{aligned} \tag{4.2.34}$$

çözümü elde edilir(Jazbi, 2009).

Ayrıca, ikinci bir çözüm yolu olarak, varyasyonel iterasyon yöntemine göre y yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. (4.2.22) iterasyon formülü kullanıldığında

$$\psi_{n+1}(x,y,t) = \psi_n(x,y,t) + \int_0^y (2\mu-2y)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,\mu,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,\mu,t)}{\partial \mu^2}\right)\right.$$

$$\left. +2|\psi_n(x,\mu,t)|^2\psi_n(x,\mu,t)\right)d\mu,\ n \geq 0 \tag{4.2.35}$$

y yönündeki iterasyon formülü olur. Bu durumda y yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,t) = (a+by)e^{i(x+t)} \tag{4.2.36}$$

biçiminde şeçilebilir. (4.2.36) yaklaşımı, (4.2.35) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = \left(a+by-a(4a^2-3)\frac{y^2}{2!}-b(28a^2-3)\frac{y^3}{3!}-80ab^2\frac{y^4}{4!}-80b^3\frac{y^5}{5!}\right)e^{i(x+t)} \tag{4.2.37}$$

yaklaşımı elde edilir. (4.2.37) eşitliğinin sağlanması için (4.2.32) sınır koşullarından $a=1$ ve $b=i$ bulunur. Böylece,

$$\psi_0(x,y,t) = (1+iy)e^{i(x+t)} \tag{4.2.38}$$

olur ve (4.2.38) yaklaşımı (4.2.35) iterasyon formülünde yerine yazılırsa,

$$\psi_1(x,y,t) = (1+iy+\frac{(iy)^2}{2}+\frac{25(iy)^3}{6}+\frac{10(iy)^4}{3}+\frac{5(iy)^5}{24})e^{i(x+t)}$$

bulunur. Bulunan ψ_0, ψ_1 yaklaşımları ve (4.2.35) iterasyon formülünü kullanarak y yönündeki aşağıdaki yaklaşımları elde ederiz:

$$\psi_2(x,y,t) = (1+iy+\frac{(iy)^2}{2}+\frac{25(iy)^3}{6}+\frac{10(iy)^4}{3}+\frac{5(iy)^5}{24}+\frac{49(iy)^6}{18}+\cdots)e^{i(x+t)},$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x,y,t) = (1+iy+\frac{(iy)^2}{2}+\frac{25(iy)^3}{6}+\frac{10(iy)^4}{3}+\frac{5(iy)^5}{24}+\frac{49(iy)^6}{18}+\cdots)e^{i(x+t)}.$$

Bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)$$

hesaplandığında (4.2.34) çözümü elde edilir. Her iki çözüm yolu sonucunda aynı sonuçlar bulunur.

4.2.3. Örnek:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V\,\psi+|\psi|^2\psi,\ \ t>0,\ \ x,y,z\in[0,2\pi] \tag{4.2.39}$$

üç boyutlu lineer olmayan Schrödinger denklemini

$$V(x,y,z) = 1-\sin^2 x\sin^2 y\sin^2 z$$

potansiyelini

$$\psi(x,y,z,0) = \sin x\sin y\sin z \tag{4.2.40}$$

başlangıç koşulu ve

$$\psi(0,y,z,t)=0,\ \psi_x(0,y,z,t)=\ e^{-\frac{5}{2}it}\sin y\sin z$$
$$\psi(x,0,z,t)=0,\ \psi_y(x,0,z,t)=\ e^{-\frac{5}{2}it}\sin x\sin z \tag{4.2.41}$$
$$\psi(x,y,0,t)=0,\ \psi_z(x,y,0,t)=\ e^{-\frac{5}{2}it}\sin x\sin y$$
sınır koşullarını göz önüne alarak çözelim(Taghizadeh, Noori, 2016). Bu örneğe karşılık gelen iterasyon formülü $n\geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t)=\psi_n(x,y,z,t)+i\int_0^t\left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z,\varepsilon)}{\partial y^2}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{\partial^2\psi(x,y,z,\varepsilon)}{\partial z^2}\right)+(1-\sin^2x\sin^2y\sin^2z)\psi(x,y,z,t)+|\psi_n(x,y,z,\varepsilon)|^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\right)d\varepsilon \tag{4.2.42}$$

biçimindedir.

Başlangıç yaklaşımı,

$$\psi(x,y,z,0)=\sin x\sin y\sin z$$

başlangıç koşulundan, $\psi_0(x,y,z,t)=\psi(x,y,z,0)=\sin x\sin y\sin z$ biçiminde seçilebilir. Seçilen bu yaklaşım (4.2.42) iterasyon formülünde kullanıldığında aşağıdaki yaklaşımlar hesaplanır:

$$\psi_1(x,y,z,t)=\left(1-\frac{5}{2}it\right)\sin x\sin y\sin z,$$
$$\psi_2(x,y,z,t)=\left(1-\frac{5}{2}it-\frac{25}{8}t^2+\cdots\right)\sin x\sin y\sin z,$$
$$\psi_3(x,y,z,t)=\left(1-\frac{5}{2}it-\frac{25}{8}t^2+\frac{125}{48}it^3+\cdots\right)\sin x\sin y\sin z,$$
$$\vdots$$
$$\psi_n(x,y,z,t)=\left(1+\frac{1}{1!}\left(\frac{-5it}{2}\right)+\frac{1}{2!}\left(\frac{-5it}{2}\right)^2+\frac{1}{3!}\left(\frac{-5it}{2}\right)^3\right.$$
$$\left.+\cdots+\frac{1}{n!}\left(\frac{-5it}{2}\right)^n+\cdots\right)\sin x\sin y\sin z.$$

Buradan,

$$\psi(x,y,z,t)=\lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-5it}{2}\right)^n\sin x\sin y\sin z$$
$$=\ e^{-\frac{5}{2}it}\sin x\sin y\sin z \tag{4.2.43}$$

çözümü bulunur.

Bu problemin varyasyonel iterasyon yöntemiyle elde edilen çözümü, Taghizadeh, Noori, (2016)'nın indirgenmiş diferansiyel dönüşüm yöntemiyle elde edilen çözümü ile aynıdır.

İkinci bir çözüm yolu olarak, z yönündeki iterasyon formülü kullanılarak da yaklaşık çözümler belirlenebilir. Bu problem için varyasyonel iterasyon yöntemine göre (4.2.6) kullanıldığında $n \geq 0$ için

$$\psi_{n+1}(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z,t) + \int_0^z (2\varsigma - 2z)\left(i\frac{\partial\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial y^2}\right.$$
$$\left.+\frac{\partial^2\psi_n(x,y,\varsigma,t)}{\partial \varsigma^2} + (1-\sin^2 x\sin^2 y\sin^2 z)\psi(x,y,z,t) + |\psi_n(x,y,z,\varepsilon)|^2\psi_n(x,y,z,\varepsilon)\right)d\varsigma, \tag{4.2.44}$$

biçiminde z yönündeki iterasyon formülü bulunur. Bu durumda z yönünde sıfırıncı yaklaşım, a ve b sabitler olmak üzere,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x\sin y\,(a+bz)e^{-\frac{5}{2}it} \tag{4.2.45}$$

biçiminde seçilebilir. (4.2.45) yaklaşımı ve (4.2.44) iterasyon formülü kullanılarak elde edilen ψ_1 yaklaşımının, (4.2.41) sınır koşullarını sağlaması için $a = 0$ ve $b = 1$ olmalıdır. Bu durumda,

$$\psi_0(x,y,z,t) = \sin x\sin y\, ze^{-\frac{5}{2}it},$$
$$\psi_1(x,y,z,t) = \sin x\sin y\,(z - \frac{z^3}{3!} + \cdots)e^{-\frac{5}{2}it}$$

bulunur. Böylece, (4.2.44) iterasyon formülünü kullandığımızda

$$\psi_2(x,y,z,t) = \sin x\sin y\,(z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} + \cdots)e^{-\frac{5}{2}it},$$
$$\psi_3(x,y,z,t) = \sin x\sin y\,(z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \frac{z^7}{7!} + \cdots)e^{-\frac{5}{2}it},$$
$$\vdots$$
$$\psi_n(x,y,z,t) = \sin x\sin y\left(z - \frac{z^3}{3!} + \frac{z^5}{5!} - \frac{z^7}{7!} + \frac{z^9}{9!} + \cdots\right)e^{-\frac{5}{2}it}$$

yaklaşımlarını elde ederiz. Bulunan bu yaklaşımlar için

$$\psi(x,y,z,t) = \lim_{n\to\infty}\psi_n(x,y,z,t)$$

hesaplandığında (4.2.43) çözümü elde edilir.

BÖLÜM 5

SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Bu çalışmada, homojen, homojen olmayan, lineer ve lineer olmayan adi ve kısmi diferansiyel denklemlerin çözümlerinin araştırılmasında He'nin varyasyonel iterasyon yönteminin nasıl kullanıldığı incelenmiştir. $\psi = \psi(x, y, z, t)$ ve $V = V(x, y, z)$ olmak üzere,

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \psi + V\,\psi \tag{5.1}$$

lineer Schrödinger denklemine ve

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2 \psi + V\,\psi + \beta|\psi|^2\psi \tag{5.2}$$

lineer olmayan Schrödinger denklemine He'nin varyasyonel iterasyon yöntemi başarılı bir şekilde uygulanmıştır ve çözümler elde edilmiştir.

Varyasyonel iterasyon yöntemi, problemlerin fiziksel yapısını değiştirebilecek bir dönüşüm uygulamadan hızlı yakınsayan ve etkili ardışık yaklaşımlar verir. Dolayısıyla her diferansiyel denkleme doğrudan uygulanabilen bir yöntemdir. Bu yöntem ile elde edilen çözümler, mevcut yöntemlerle karşılaştırıldığında varyasyonel iterasyon yöntemi, doğruluk ve hızlı yakınsama açısından oldukça etkilidir.

Bu çalışmada diferansiyel denklemlerin yaklaşık çözümlerini elde etmek için incelenen varyasyonel iterasyon yöntemi, henüz çözümü olmayan farklı problemlerin araştırılmasında kullanılabilir. Bu yöntemin geliştirilmesine yönelik yapılan çalışmalar göz önünde bulundurularak farklı yöntemler geliştirmek anlamında katkı sağlanabilir.

KAYNAKLAR

Abdou M. A. & Soliman A. A. (2005). Variational iteration method for solving Burger's and coupled Burger's Equation. *Journal of Computational and applied mathmematics, 181*, 245-251.

Altıntan. D. & Uğur. Ö. (2011). Generalisation of the Lagrange multipliers for variations applied to systems of differential equations. *Mathematical and Computer Modelling, 54,* 2040-2050.

Carinena, J. F., Ibort, A., Marmo, G. & Morandi, G. (2015). *Geometry from Dynamics, Classical and Quantum.* London: Springer.

Chakraverty, S., Mahato, N. R., Karunakar, P. & Rao, D. T. (2019). *Advanced Numerical and Semi-Analytical Methods for Differential Equations,* India: ProQuest Ebook Central, 142-146.

Dehghan, M. & Mirzaei, D. (2008). Numerical solution to the unsteady two-dimensional Schrödinger equation using meshless local boundary integral equation method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. *76,* 501-520.

Elsgolts, L. (1977). *Differential Equations and the Calculus of Variations*. Moscow: Mir Publishers.

Eskar, R., Huang, P. & Feng, X. (2018). A new high-order compact ADI finite difference scheme for solving 3D nonlinear Schrödinger equation. *Advances in Difference Equations, 286,* 2480-2484.

Gelfand, I. M. & Fomin, S. V. (1963). *Calculus of Variations.* New Jersey: Prentice Hall.

Ghanbari, B. (2014). An Analytical Study for (2 + 1)-Dimensional Schrödinger Equation. *The Scientific World Journal,* 1-4.

Günay, G. (1978). *Varyasyonlar Hesabı*. İstanbul: İ.D.M.M.A. Yayınları.

Hemeda. A. A. (2008). Variational iteration method for solving wave equation. *Computers and Mathematics with Applications*, *56,* 1948-1953.

He, J. H. & Latifizadeh, H. (2020). A General Numerical Algorithm for Nonlinear Differantial Equations by the Variational Iteration Method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, *30*, 4797-4810.

He, J. H. & Wu, X. H. (2007). Variational Iteration method: New development and applications. *Computers & Mathematics with Applications*, *54*, 881-894.

He, J. H. (1997). A New Approach to Nonlinear Partial Differential Equations. *Communications in Nonlinear Science & Numerical Simulation*, *4*, 230-235.

Hosseinzadeh, Kh. (2017). An analytic Approximation to the Solution of Schrödinger Equation by VIM. *Applied Mathematical Sciences, 16*, 813-8.

Inokuti M., Sekine H. & Mura T. (1978). General use of Lagrange multiplier in nonlinear mathematical physics, International Union of Theoretical and Applied Mechanics, *Variational Methods in the Mechanics of Solids*, Hindawi Publishing Corporation the Scientfic World Journal, 56-162.

Jafari, H., Chun, Ch. & Khalique, C. M. (2011). The Variational method for Finding Exact Solution of Nonlinear Gas Dynamics Equations. *Verlag der Zeitschrift für Naturforschung*, 66a, 161-164.

Jazbi, B. & Moini, M. (2009). The Variational Iteration Method for Solving Linear and Nonlinear Schrodinger Equations. *Mashhad R. J. Mathematic Science*, *2*, 43-51.

Karaoğlu, B., (1994). *Kuantum Mekaniğine Giriş.* İstanbul: Bilgi Tek Yayınları.

Kolmogorov, A.N. & Fomin, S. V. (1961). *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis*. New York: Dover Publications.

Mohebbi, A. & Dehghan, B. (2009). The Use of Compact Boundary Value Method for the Solution of Two-Dimensional Schrödinger Equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics, 22,* 124–134.

Olayiwola, M. O. (2015). The Variational Iteration Method for Analytic Treatment of Homogeneous and Inhomogeneous Partial Differential Equations. *Global Journal of Science Frontier Research, No.5F,* 15.

Pitaevskii, L. & Stringari, S. (2003). *Bose-Einstein Condensation*. Russia: Oxford Science Publications.

Ramesh Rao, T. R. (2016). A Study on Linear and Nonlinear Schrodinger Equations by Reduced Differential Transform Method. *Malaya Journal of Matematik*, *4*, 59-64.

Schultz, T. & Vrakking, M. (2014). *Attosecond and XUV Physics.* Germany:Wiley-Vch.

Serway, R. A. & Jewett, Jr. J. W. (2012*). Pyhsics for Scientists and Engineers with Modern Physics.* Los Angeles: Brooks Cole.

Taghizadeh, N. & Moosavi Noori S. R. (2016). Exact Solution of the Cubic Nonlinear Schrödinger Equation with a Trapping Potential by Reduced Differential Transform Method. *Mathematical Sciences Letters, 5*, 297-302.

Wazwaz, A. M. & El-Tantawy, S. A. (2019). Optical Gaussons for Nonlinear Logarithmic Schrödinger Equations via the Variational Iteration Method. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, *18*0, 414–418.

Wazwaz, A. M. (2009). The Variational Iteration Method for Analytic Treatment for Linear and Nonlinear ODES. *Applied Mathematics and Computation*, *212*, 120-134.

Yıldırım, A. & Öziş, T. (2009). Solutions of singular IVPs Lane-Emden type by the variational iteration method. *Nonlinear Analysis*, *70*, 2480-2484.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı : Ece GÜNEŞ

Doğum Yeri ve Tarihi : İstanbul / 1994

Email : ecegunes@trakya.edu.tr

Eğitim Bilgileri

Lise	: Mehmet Baydar Anadolu Lisesi, İstanbul	2013
Lisans	: Matematik, Trakya Üniversitesi, Edirne	2018

İş Deneyimleri

2017-2018 : İstanbul Rumeli Kişisel Gelişim Kursu, Matematik Öğretmeni

TEZ İLE İLGİLİ BİLİMSEL FAALİYETLER

Güneş, E. & Güleroğlu, A. (2020). *Variational iteration method for solving the linear 3D Schrödinger equation*. 3rd International Conference on Pure and Applied Mathematics (ICPAM-VAN 2020) Konferansında sunulan sözlü bildiri, Van Yüzüncü Yıl University,Van. Erişim adresi: http://icpam.yyu.edu.tr/