บทที่ 2
เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

บทนี้จะกล่าวถึงเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องประกอบด้วย สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นและวิธีเมชเลส

สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น

จากการศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวกับสมการแบบไม่เป็นเชิงเส้นพบว่า สมการที่ใช้อธิบายปัญหาแบบไม่เป็นเชิงเส้นในวิชาฟิสิกส์ อาทิ ทัศนศาสตร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น ควอนตัมจลนศาสตร์ของของไหล และฟิสิกส์พลาสมา คือ สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น

ตัวอย่างของรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น (Polyanin & Zaitsev, 2004) เช่น

รูปแบบแรกของสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + f(|\Psi|)\Psi = 0 \qquad (2.1)$$

รูปแบบที่สองของสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{1}{x^n}\frac{\partial}{\partial x}\left(x^n \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) + f(|\Psi|)\Psi = 0 \qquad (2.2)$$

ถ้า $n = 1$ คือ สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น 2 มิติ โดยมีแกนสมมาตร และ $n = 2$ คือ สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น 3 มิติ โดยมีศูนย์กลางสมมาตร

รูปแบบที่สามของสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นกำลังสาม

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left[g(t)|\Psi|^2 + h(t)\right]\Psi = 0 \qquad (2.3)$$

เมื่อ Ψ คือ ฟังก์ชันเชิงซ้อน (Complex Function) ของตัวแปรจริง x และ t

$f(|\Psi|) = A|\Psi|^2 + B|\Psi| + C$

A, B และ C คือ ค่าคงที่

$g(t)$ และ $h(t)$ คือ ฟังก์ชันจริงของตัวแปรจริง

ตัวอย่างเอกสารและงานวิจัยที่ศึกษาเกี่ยวกับสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น เช่น

Adhikari (2007) ใช้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นอธิบายเกี่ยวกับการควบแน่นโบซ์–ไอน์สไตน์ (Bose–Einstein Condensation) ในกำแพงศักย์สามมิติ เพื่ออธิบายจุดวิกฤตของพลังงานอิเล็กตรอนคงตัวเมื่ออยู่ในสถานะถูกกักประจำ (Normalizable Bound States) ถ้าพจน์ไม่เป็นเชิงเส้นต่ำกว่าจุดวิกฤต จะทำให้ระบบมีแรงดึงดูดและไม่เสถียร แต่ถ้าพจน์ไม่เป็นเชิงเส้นสูงกว่าจุดวิกฤต จะทำให้ระบบมีแรงผลักและไม่ถูกกักไว้ สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้ศึกษาจะอยู่ในรูปทรงกลมสมมาตร 3 มิติ เขียนรูปสมการได้

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial R^2}-\frac{2}{R}\frac{\partial}{\partial R}\right)+V(R)+G\left|\Phi(R;\tau)\right|^2\right]\Phi(R;\tau) = 0 \qquad (2.4)$$

เมื่อ $G = 4\pi\hbar^2 aN/m$ คือ พจน์ไม่เป็นเชิงเส้น, $V(R)$ คือ บ่อศักย์สี่เหลี่ยม, N คือ จำนวนอะตอม, a คือ ระยะกระเจิงของอะตอม และ m คือ มวลของแต่ละอะตอม เพื่อสะดวกในการคำนวณ จึงเขียนรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นได้ใหม่

$$\left[-i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+V(r)+g\left|\Psi(r;t)\right|^2\right]\Psi(r;t) = 0 \qquad (2.5)$$

เมื่อ $r = R/l$, $t = \tau\omega/2$, $\Psi = \Phi l^{3/2}$ และ $V(r) = 2v(R)/(\hbar\omega)$ โดย $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$, ω คือ ความถี่เชิงมุมที่อ้างอิงจากภายนอก และ $g = 8\pi aN/l$ ซึ่งบ่อศักย์สี่เหลี่ยมมีขอบเขตของปัญหา คือ $V(r) = -\gamma^2, r \le \Lambda$; $V(r) = 0, r > \Lambda$ เมื่อ γ^2 คือ ความลึกของบ่อศักย์สี่เหลี่ยม และ Λ คือ ขอบเขตของบ่อศักย์สี่เหลี่ยม

ตัวอย่างงานวิจัยนี้มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น คือสมการที่ 2.4 และสมการที่ 2.5 มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นคล้ายสมการที่ 2.2

Chen, Kevrekidis, and Malomed (2009) ศึกษาเกี่ยวกับสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นภายใต้พจน์ไม่เป็นเชิงเส้นแบบสุ่ม พิจารณาคลื่นเดี่ยวในสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นใน 1 มิติและ 2 มิติ ในกรณี 1 มิติ จะพิจารณาผลของการสุ่มในการปรับเปลี่ยนเวลาของพจน์สัมประสิทธิ์ไม่เป็นเชิงเส้น ซึ่งโซลิตอนจะยังคงอยู่ได้นานภายใต้พจน์ไม่เป็นเชิงเส้นแบบสุ่ม รูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้ในการแก้ปัญหากรณี 1 มิติ

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + g(t)|u|^2 u = 0 \tag{2.6}$$

ในกรณี 2 มิติ ส่วนแบ่งการทำให้เป็นจริงนำไปสู่การหายไปของสัญญาณที่คำนวณ ดังนั้นจึงหาจำนวนผลกระทบของการสุ่มในการป้องกันการหายไปของสัญญาณ รูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้ในการแก้ปัญหากรณี 2 มิติ

$$iu_t + \frac{1}{2}(u_{xx} + u_{yy}) + g(t)|u|^2 u = 0 \tag{2.7}$$

เมื่อ $g(t)$ คือ พจน์สัมประสิทธิ์ไม่เป็นเชิงเส้นของการสุ่มในการปรับเปลี่ยนเวลา

ตัวอย่างงานวิจัยนี้มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น คือสมการที่ 2.6 และสมการที่ 2.7 มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นคล้ายสมการที่ 2.3

Lott, Henriquez, Sturdevant, and Biswas (2009) ศึกษาการแพร่ของลำแสงที่มีโครงสร้างคล้ายโซลิตอนจากสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่มีกฎความไม่เป็นเชิงเส้นของตัวกลางในรูปรากที่สอง การสลายของโซลิตอนจะขึ้นอยู่กับพจน์ไม่เป็นเชิงเส้นของสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น ซึ่งพจน์ไม่เป็นเชิงเส้นจะประกอบด้วยเคอร์–ลอว์ (Kerr–Law) กับการดูดกลืนของโฟตอนสองตัว ซึ่งเป็นสาเหตุที่ทำให้เกิดการสลายของโซลิตอน โดยสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นสำหรับแสงที่มีการเปลี่ยนแปลงอย่างช้า ๆ ในสนามไฟฟ้า E สามารถเขียนรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นได้

$$i\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + f(I)E = 0 \tag{2.8}$$

เมื่อ x คือ ตำแหน่ง, t คือ เวลา และ I คือ ผลรวมของความเข้มลำแสง ให้เคอร์–ลอว์ความไม่เป็นเชิงเส้นของตัวกลางอยู่ในรูป

$$f(I) = -\frac{1}{\sqrt{1+I}} \quad \text{สำหรับ} \quad I = |E|^2 \tag{2.9}$$

ตัวอย่างงานวิจัยนี้มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น คือสมการที่ 2.8 มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นคล้ายสมการที่ 2.1

Raza, Sial, Siddiqi, and Lookman (2009) ศึกษาพลังงานต่ำสุดสัมพันธ์กับสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น โดยใช้เทคนิคเกรเดียนต์โซโบเลฟ (Sobolev Gradient) กับปัญหาฟังก์ชันนัลชเรอดิงเงอร์ต่ำสุดที่เกี่ยวข้องกับสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น ในการหาสถานะพลังงานต่ำสุดของฟังก์ชันนัลชเรอดิงเงอร์ ซึ่งสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้จะอยู่ในรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นกำลังสาม คือ

$$\phi(\psi) \quad = \quad \int_V \frac{\beta}{4}|\psi|^4 + \frac{1}{2}|\nabla\psi|^2 dx \tag{2.10}$$

ภายใต้เงื่อนไข คือ $\int_V |\psi|^2 = N$ เมื่อ V คือ พื้นที่ขอบเขต และ N คือ ค่าคงที่สำหรับ $\psi = u + iv$ เป็นสนามเชิงซ้อนในพื้นที่ขอบเขต

ตัวอย่างงานวิจัยนี้มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น คือสมการที่ 2.10 มีรูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นคล้ายสมการที่ 2.1

มีงานวิจัยเกี่ยวกับการหาผลเฉลยของสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นอยู่มากมาย เช่น

Adhikari (2007) การหาผลเฉลยจากสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ใช้อธิบายการควบแน่นโบซ์–ไอน์สไตน์ในกำแพงศักย์สามมิติมี 2 วิธี คือ วิธีการวิเคราะห์และวิธีเชิงตัวเลข ซึ่งวิธีการวิเคราะห์จะใช้การแปรผันที่มีฟังก์ชันคลื่นอยู่ในรูปเกาส์เซียน ส่วนวิธีเชิงตัวเลขใช้การประมาณทอมัส–เฟอมิ (Thomas–Fermi Approximation)

Carles (2007) การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นกึ่งคลาสสิกที่เกี่ยวกับศักย์ด้วยวิธีการวิเคราะห์แบบดับเบิลยูเคบี (WKB analysis)

Raza et al. (2009) การหาค่าพลังงานต่ำสุดจากสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นโดยใช้เทคนิคเกรเดียนต์โซโบเลฟ โดยเลือกค่าเกรเดียนต์โซโบเลฟที่เหมาะสม เพื่อนำมาใช้ในการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอันตะและวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์

Taha and Xu (2005) การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นแบบคู่ (Coupled Nonlinear Schrödinger) เพื่อหาผลเฉลยเชิงตัวเลขด้วยวิธีฟูเรียร์แบบแบ่งขั้นตอนขนาน (Parallel Split–Step Fourier Method)

Xu and Shu (2005) การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นรูปทั่วไปและสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นแบบคู่ โดยวิธีเชิงตัวเลขแบบวิธีไม่ต่อเนื่องเฉพาะที่ของกาเลอร์คิน (Local Discontinuous Galerkin)

จากการศึกษางานวิจัยข้างต้น พบว่ามีการนำสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นใช้ในการอธิบายปัญหาและหาผลเฉลยด้วยวิธีการคำนวณแบบต่าง ๆ แต่วิธีการแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นที่ผู้วิจัยสนใจจะศึกษาเป็นวิธีเชิงตัวเลข วิธีการดังกล่าว คือ วิธีเมชเลส

วิธีเมชเลส

วิธีเชิงตัวเลขที่ใช้ในการแก้สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยมีหลายวิธี เช่น วิธีผลต่างอันตะเป็นวิธีที่เข้าใจได้ง่ายและไม่ยุ่งยากในการแก้ปัญหา แต่มีข้อจำกัดในการแก้ปัญหาระบบที่มีเงื่อนไขขอบเขตและรูปร่างของปัญหาที่ซับซ้อน จากข้อจำกัดดังกล่าววิธีไฟไนต์เอลิเมนต์จึงเป็นอีกวิธีที่น่าสนใจ เนื่องจากมีความยืดหยุ่นในการแก้ปัญหาเหล่านี้ได้ดีกว่า แต่วิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ยังมีความยุ่งยากในการสร้างเอลิเมนต์ เนื่องจากใช้เวลานาน จากข้อจำกัดดังกล่าวจึงมีการศึกษาวิจัยและพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น เพื่อลดเวลาในการสร้างเอลิเมนต์ วิธีการดังกล่าวเรียกว่า วิธีเมชเลส

จากการศึกษาค้นคว้าบทความและงานวิจัย พบว่าวิธีเมชเลสมีหลายวิธี เช่น วิธีการประมาณกำลังสองน้อยสุดแบบเคลื่อนที่ (Moving Least Squares Approximations) (Boresi, Chong, & Saigal, 2003), วิธีการประมาณพื้นที่เชิงอนุพันธ์ (Differential Quadrature Method) (สมชาติ ฉันทศิริวรรณ, 2546), วิธีเมชเลสเฉพาะที่ของพีทรอฟกาเลอร์คิน (Local Meshless Petrov-Galerkin Method) (Dang & Sankar, 2008; Han, Liu, Rajendran, & Atluri, 2006), วิธีผลต่างอันตะแบบทั่วไป (Generalized Finite Difference Method) (Luo & Häussler-Combe, 2002), วิธีการประมาณฟังก์ชันฐานเชิงรัศมี (Radial Basis Function Interpolation Method) (Tseng & Lee, 2009), วิธีการประมาณค่าในช่วงตำแหน่ง (Point Interpolation Method) (Wang & Liu, 2002) และวิธีกาเลอร์คินโดยไม่ใช้เอลิเมนต์ (Element-Free Galerkin Method) (Belytschko, Lu, & Gu, 1994) เป็นต้น

การคำนวณด้วยวิธีเมชเลสมีวิธีการและแนวคิดดังนี้ เริ่มจากการแปลงสมการเชิงอนุพันธ์ให้อยู่ในรูปสมการอินทิกรัล ทำการเลือกฟังก์ชันฐานที่เหมาะสม จากนั้นนำผลเฉลยโดยประมาณแทนลงไปในสมการอินทิกรัล และแปลงสมการอินทิกรัลให้อยู่ในรูปสมการเมตริกซ์แล้วจึงคำนวณหาผลเฉลยโดยประมาณต่อไป

การแปลงสมการเชิงอนุพันธ์ที่ต้องการศึกษาให้อยู่ในรูปของสมการเมตริกซ์ด้วยวิธีเมชเลส สามารถแปลงได้ด้วยแคลคูลัสแปรผัน ซึ่งรูปของแคลคูลัสแปรผันมี ดังนี้ รูปแบบเข้ม (Strong Form) และรูปแบบอ่อน (Weak Form)

ตัวอย่างบทความและงานวิจัยที่ใช้หลักการของแคลคูลัสแปรผันรูปแบบอ่อนในการแปลงสมการเชิงอนุพันธ์ให้อยู่ในรูปของสมการเมตริกซ์ เช่น Han et al. (2006) ใช้วิธีเมชเลสเฉพาะที่ของพีทรอฟกาเลอร์คิน, Zhu, Zhang, and Atluri (1999) ใช้วิธีการประมาณกำลังสองน้อยสุดแบบเคลื่อนที่, Belytschko et al. (1994) ใช้วิธีกาเลอร์คินโดยไม่ใช้เอลิเมนต์, Zhang (2007) ใช้วิธีเมชเลสของพีทรอฟกาเลอร์คิน และ Nguyen, Rabczuk, Bordas, and Duflot (2008) ใช้วิธีเมชเลสด้วยวิธีกาเลอร์คิน เป็นต้น

หลักการทั่วไปของแคลคูลัสแปรผันรูปแบบอ่อนมีขั้นตอน ดังนี้

จากรูปสมการเชิงอนุพันธ์ในรูปทั่วไปได้

$$O\Psi(x,t) = q(x) \tag{2.11}$$

เมื่อ O คือ ตัวดำเนินการใด ๆ

$\Psi(x,t)$ คือ ผลเฉลยโดยประมาณ

$q(x)$ คือ พจน์ไม่เอกพันธุ์ (Non-Homogeneous Term)

รูปทั่วไปของผลเฉลยโดยประมาณ คือ

$$\Psi = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi_i(x) \tag{2.12}$$

เมื่อ α_i คือ สัมประสิทธิ์ของฟังก์ชันฐาน

$\phi_i(x)$ คือ ฟังก์ชันฐาน

ขั้นตอนแรก เริ่มจากนำฟังก์ชันทดสอบ (Test Function) คูณเข้าไปในสมการที่ 2.11 และทำการอินทิเกรตโดยการแยกส่วน เขียนสมการได้

$$\int (O\Psi) v\,dx = \int q\,v\,dx \tag{2.13}$$

เมื่อ v คือ ฟังก์ชันทดสอบ

ขั้นตอนต่อไป ทำการเลือกฟังก์ชันฐานที่เหมาะสมคือ ฟังก์ชันฐานเชิงพหุนาม เช่น ฟังก์ชันฐานเชิงเส้น (Linear Basis Function), ฟังก์ชันฐานกำลังสอง (Quadratic Basis Function) เป็นต้น หรือฟังก์ชันฐานเชิงรัศมี เช่น ฟังก์ชันฐานกำลังสาม (Cubic Basis Function), ฟังก์ชัน

ฐานแผ่นบางเสมือนพหุนาม (Thin Plate Splines Basis Function), ฟังก์ชันฐานรากที่สอง (Multiquadrics Basis Function) และฟังก์ชันฐานเกาส์เซียน (Gaussian Basis Function) เป็นต้น

ตัวอย่างงานวิจัยที่เลือกใช้ฟังก์ชันฐานเชิงพหุนาม เช่น Boresi et al. (2003), สมชาติ ฉันทศิริวรรณ (2546), Luo and Häussler–Combe (2002), Wang and Liu (2002) และ Belytschko et al. (1994) เป็นต้น ส่วนตัวอย่างงานวิจัยที่เลือกใช้ฟังก์ชันฐานเชิงรัศมี เช่น Tseng and Lee (2009), Zhang (2007), Lec, Liu, and Fan (2003), Shokri and Dehghan (2010) เป็นต้น

ตัวอย่างของรูปฟังก์ชันฐานที่ผู้วิจัยสนใจ คือ ฟังก์ชันฐานเกาส์เซียน (Wang & Liu, 2002 ; Haq, Bibi, Tirmizi, & Usman, 2010) คือ

$$\phi(\bar{r}) \quad = \quad e^{-cr^2} \tag{2.14}$$

โดย c คือ ค่าพารามิเตอร์ของฟังก์ชันฐาน

r คือ $\|r - r_i\|$

เมื่อได้ฟังก์ชันฐานที่เหมาะสมแล้ว นำฟังก์ชันฐานแทนลงในผลเฉลยโดยประมาณ และนำผลเฉลยโดยประมาณแทนกลับลงไปในสมการที่ 2.13 จากนั้นจัดรูปสมการที่ 2.13 ให้อยู่ในรูปสมการเมตริกซ์ คือ

$$\underline{K}\underline{u} = \underline{q} \tag{2.16}$$

และคำนวณหาผลเฉลยโดยประมาณต่อไป