

085851 – פרויקט מחקר 1

דף שער לדו"ח סיכום פרויקט

חקירת השימוש בשיטת אנליזה הומוטופית לבעית תנועת חלקיק בשדה
זרימה תונד

שם הסטודנט : עמית סיגאווי

ת.ז. : 207203050

מנחה : פרופסור ברי גרינברג

תוכן עניינים

3	מבוא
3	רקע
3	מטרת הפרוייקט
5	מבוא ל- HAM
7	ניסוח הבעיה המתמטית
7	תיאור הבעיה
8	תוצאות המאמר
9	יישום ה- HAM בבעיה
17	ניתוח תוצאות HAM
22	מחקר עתידי לפרוייקט
23	סיכום
24	ביבליוגרפיה
26	נספחים

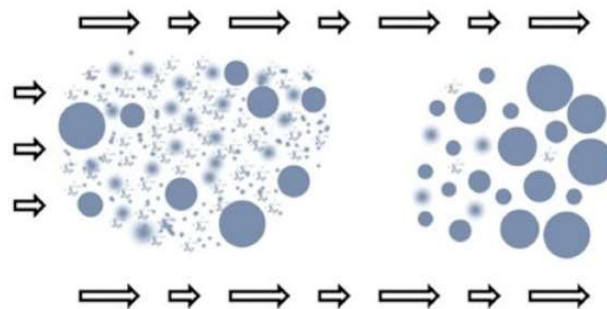
רקע

לנושא של מיקרו וננו חלקיקים קיימת חשיבות עצומה, זאת מלבד התחום של הננו-טכנולוגיה. תחום נוסף שקשור לננו-חלקיקים הינו סביבתי ובריאותי – חלקיקים הנפלטים מכלי רכב, עשן סיגריות, מפעלים ותעשיות, אבק מינרלי ועוד. דוגמה נוספת רלוונטית לחשיבות של נושא החלקיקים הזעירים היא נגיף הקורונה שהדבקה בו מאדם לאדם היא בעיקר טיפיתית מחלקיקים שבקוטר $[140[nm] - 60[nm]$ [1].

כדי לצמצם את פליטת החומרים המזיקים משתמשים במסנן אך במקרים רבים בשל גודלם הקטן של החלקיקים הם מצליחים לעבור דרך הרשת של המסנן. מסננים שמדורגים כמסנני חלקיקי אוויר באיכות גבוהה מסירים חלקיקים בקוטר שגדול מ- $0.3\mu m$ ביעילות של 99.7% [2]. מהגדרה זו אנו למדים על הקושי הקיים בלכוד במסנן חלקיקים שגודלם קטן מ- $0.3\mu m$, שזהו תחום בו נכללים יותר מ- 99% מהריכוז הכולל של חלקיקים בסביבה האטמוספירית הסביבתית.

על מנת להתמודד עם בעיה זו, הראו פרופסור דוד קטושבסקי ועמיתיו שניתן להפחית את מספר החלקיקים ולהגדיל את גודלם של אלו הקיימים באמצעות קידום ההתקבצות (*grouping*) של החלקיקים כאשר הם נמצאים בשדה זרימה, וכך ניתן יהיה ללכוד את החלקיקים הקטנים שייתפסו ברשת של המסננת [3,4]. מחקרים אלה הובילו למודל מתמטי שחשף מגוון של תנאי הפעלה שבהם מתרחשים מודים שונים של התקבצות – התקבצות יציבה, התקבצות לא יציבה ואי-התקבצות (*non-grouping*), כלומר כתלות בפרמטרי הבעיה כמו גודל החלקיקים ומספר סטוקס, ניתן לקבל בתנאים מסויימים התקבצות, בעוד שבתנאים אחרים לא. מודל זה איפשר עיצוב מקדים למערכת פליטת מנוע של רכב שמקדם את ההתקבצות של חלקיקי עשן, דבר שמוביל לסינון טוב יותר של חלקיקים בגודל מיקרון ותת-מיקרון, תחת תנאים מסויימים [5].

באור 1 ניתן לראות תרשים סכמטי של התקבצות חלקיקים בשדה הזרימה עקב תנודות מקומיות במהירות הגז אשר מקדמות את התקבצות החלקיקים במורד הזרם. אורכי החצים המשתנים מייצגים את גודל מהירות הזרימה המשתנה וכיונם מייצגים את כיוון מהירות הזרימה.



איור 1: תרשים סכמטי להתקבצות חלקיקים בשדה זרימה

מטרת הפרוייקט

מטרת פרוייקט זה הינה למצוא פיתרון אנליטי מקורב בעזרת ה- *homotopy analysis method (HAM)* למשוואה השולטת לבעיה לא-ליניארית של התקבצות טיפות בשדה זרימה חד-מימדי תונד שמתואר על-ידי המשוואה:

$$u^*(x^*, t^*) = U_a^* - U_b^* \sin(k^*x^* - \omega^*t^*)$$

שיטות נומריות מניבות נקודות לא רציפות של עקום ולכן לרוב פיתרון נומרי יקר ומצריך יותר זמן חישוב כדי לקבל את התוצאות המלאות. בנוסף, לעיתים קרובות קשה מתוך התוצאות הנומריות לקבל הבנה מהותית על הבעיה הלא-ליניארית. כמו כן, קיימים קשיים נומריים אם הבעיה הלא-ליניארית מכילה סינגולריות או מספר פתרונות. לכן, ככלל, קיימת עדיפות למציאת פתרונות אנליטיים לבעיה לא-ליניארית.

בדרך כלל קשה להשיג קירובים אנליטיים לבעיות לא-ליניאריות עם אי-ליניאריות חזקה. לכן לאורך השנים הוצעו שיטות פרטובציה ואי-פרטובציה רבות למציאת קירובים אנליטיים למשוואות לא-ליניאריות כמו *the artificial small parameter method* ו-*the δ -expansion*. באופן כללי, ביטויי הפיתרון של הבעיה הלא-ליניארית תלוי בסוג המשוואות הלא-ליניאריות ובשיטות האנליטיות שמשמשות, ותחומי ההתכנסות של טור הפיתרון תלויים במידה רבה בפרמטרים פיזיקליים. בנוסף, לעיתים קרובות קירובים אנליטיים לבעיות לא-ליניאריות נשברים ככל שאי-הליניאריות נהיית חזקה יותר והפרטובציות המקורבות תקפות רק עבור בעיות לא ליניאריות עם אי-ליניאריות חלשה. לכן נוצר הצורך לפתח שיטות אנליטיות חדשות כך שהן:

1. יהיו תקפות גם לבעיות לא-לינאריות שאינן מכילות פרמטרים קטנים/גדולים.
2. יספקו לנו דרך נוחה להתאים את איזור ההתכנסות ואת קצב ההתכנסות של הטור המקורב.
3. יתנו לנו חופש בשימוש בפונקציות בסיס שונות לקירוב הבעיה הלא לינארית.

כדי לענות על בעיות אלו הוצעה בתחילת שנות ה-90 שיטת HAM על-ידי פרופסור Shijun Liao [6,7]. שיטת זו מתבססת על מושג יסוד בטופולוגיה שנקרא הומוטופיה (homotopy). בנוסף, Liao הראה בעבודותיו שכמה מהשיטות האחרות שקדמו ל-HAM כמו פרטיים של שיטת ה-HAM [7], כמו גם שיטת homotopy perturbation method (HPM) שהוצעה בסוף שנות ה-90 שניתן להראות שהיא מקרה פרטי של שיטת ה-HAM אשר יעילה יותר [8,9]. כלומר ניתן להתייחס ל-HAM כתיאוריה מאוחדת או כללית של השיטות הללו שקדמו לה. הכלליות של השיטה מאפשרת לעיתים קרובות התכנסות חזקה של הפיתרון על פני תחומים מרחביים ותחומים פרמטריים גדולים יותר. בנוסף, שיטת ה-HAM מספקת דרך פשוטה כדי להבטיח התכנסות של טור הפתרון.

לאורך כמעט 30 השנים האחרונות גדלו מספר הבעיות הפיזיקליות המתוארות על-ידי משוואות דיפרנציאליות רגילות וחלקיות לא-לינאריות אשר שנפתרו תוך שימוש ב-HAM בתחומים שונים במדע, בהנדסה ובכלכלה כגון מעבר חום [10], מעגל חוסם של מערכות דינמיות [11], put option בכלכלה [12], משוואות Navier-Stokes המדוייקות [13], בעיות הסתעפות [14], זרימות אלקטרוהידרודינמיות [15], משוואת Poisson-Boltzmann למוליכים למחצה [16] ועוד מגוון רחב של יישומים.

לסיכום, בפרוייקט זה אבחן את השימוש בשיטת HAM לבעיה הספציפית של התקבצות טיפות מתוך המאמר [17] של פרופסור קטושבסקי ועמיתיו תוך שימוש בתוכנה Mathematica ואבצע השוואה בין הקירובים האנליטיים שאקבל בשיטת HAM לבין פתרונות נומריים מקורבים לבעיה. הפיתרון האנליטי שיפותח ישמש בסיס לעבודה עתידית שתעסוק במציאת תנאים אופטימליים להתקבצות של חלקיקים. אציין שככל הידוע למחבר הדו"ח בעיה זו טרם נפתרה אנליטית.

מבוא ל- HAM

בחלק זה אתאר את השלבים העיקריים של HAM.

ראשית אציין שלקריאה מעמיקה מופנה הקורא לספרים [7, 18,19] בהם מפורטת השיטה לפרוטות ומכילה מספר דוגמאות כמו גם למאמרים שונים בנושא.

אתאר כעת את ה- HAM:

נניח משוואה דיפרנציאלית:

$$\mathcal{N}[V(\tau)] = 0 \quad (1)$$

כאשר \mathcal{N} זה אופרטור לא לינארי, τ מצוין משתנה בלתי תלוי, ו- $V(\tau)$ זאת הפונקציה הנעלמת.

לצורך פשטות, נתעלם מכל תנאי שפה או תנאי התחלה, אשר יכולים להיות מטופלים בדרך דומה.

באמצעות הכללה של שיטת ההומוטופיה המסורתית עליה ה- HAM מתבססת כפי שצויין במבוא, נבנה את מה שנקרא "zero-order deformation equation":

$$(1 - q) \mathcal{L}[\phi(\tau; q) - V_0(\tau)] = q\hbar H(\tau) \mathcal{N}[\phi(\tau; q)] \quad (2)$$

כאשר $q \in [0,1]$ הוא embedding parameter, \mathcal{L} אופרטור עזר לינארי, $V_0(\tau)$ קירוב (ניחוש) התחלתי ל- $V(\tau)$, $\hbar \neq 0$ פרמטר עזר, $H(\tau) \neq 0$ פונקציית עזר, ו- $\phi(\tau; q)$ זה הפיתרון של ה- zero-order deformation equation והוא פונקציה של τ ושל q .

חשוב להדגיש שב- HAM קיים חופש בבחירת פרמטרי העזר והניחוש ההתחלתי.

ניתן לראות שכאשר $q = 0$ וכאשר $q = 1$ מתקיים בהתאמה:

$$\phi(\tau; 0) = V_0(\tau)$$

$$\phi(\tau; 1) = V(\tau)$$

לכן כאשר q גדל מ- 0 ל- 1, הפיתרון $\phi(\tau; q)$ של ה- zero-order deformation equation משתנה בצורה רציפה מהקירוב ההתחלתי $V_0(\tau)$ לפיתרון $V(\tau)$ של המשוואה הדיפרנציאלית המקורית (1).

נפתח את $\phi(\tau; q)$ לטור טיילור לפי q :

$$\phi(\tau; q) = V_0(\tau) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m(\tau) q^m \quad (3)$$

כאשר $V_m(\tau)$ מוגדר:

$$V_m(\tau) = \frac{1}{m!} \frac{\partial^m \phi(\tau; q)}{\partial q^m} \Big|_{q=0} \quad (4)$$

אם אופרטור העזר הלינארי \mathcal{L} , הניחוש ההתחלתי $u_0(\tau)$, פרמטר העזר \hbar ופונקציית העזר $H(\tau)$ נבחרו בצורה מתאימה כך שהפיתרון $\phi(\tau; q)$ קיים עבור כל $q \in [0,1]$, ובנוסף הנגזרות $u_m(\tau)$ שבמשוואה (4) קיימות עבור $m \in \mathbb{N}$ והטור (3) יתכנס ב- $q = 1$, נקבל תחת ההנחות הללו ש:

$$V(\tau) = V_0(\tau) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m(\tau) \quad (5)$$

שחייב להיות אחד הפתרונות של המשוואה הלא-לינארית המקורית, כפי שהוכיח Liao [7].

לשם תיאור ה- high-order deformation eq. נגדיר את הוקטור:

$$\vec{V}_n = \{V_0(\tau), V_1(\tau), V_2(\tau), \dots, V_n(\tau)\}$$

ולפי ההגדרה במשוואה (4), ניתן לקבל את המשוואה השולטת של $V_m(\tau)$ מה- *zero-order deformation eq.* באמצעות גזירה של משוואה (2) פעמים לפי q , חלוקה ב- $m!$ והצבת $q = 0$:

$$\mathcal{L}[V_m(\tau) - \chi_m V_{m-1}(\tau)] = \hbar H(\tau) R_m(\vec{V}_{m-1}), \quad m \geq 1 \quad (6)$$

כאשר:

$$\chi_m = \begin{cases} 0, & m \leq 1 \\ 1, & m > 1 \end{cases} \quad (7)$$

ו:

$$R_m(\vec{V}_{m-1}) = \frac{1}{(m-1)!} \left. \frac{\partial^{m-1} \mathcal{N}[\phi(\tau; q)]}{\partial q^{m-1}} \right|_{q=0} \quad (8)$$

יש להדגיש שהמשוואה הלינארית (6) שהיא המשוואה השולטת למציאת $V_m(\tau)$ היא משוואה רקורסיבית, כלומר תלוייה ב- \vec{V}_{m-1} בלבד ועם ת"ש לינארים שבאים מהמשוואה המקורית (1).

לבסוף, הקירוב מסדר N_{HAM} של $V(\tau)$ הינו:

$$V(\tau) \approx \sum_{m=0}^{N_{HAM}} V_m(\tau) \quad (9)$$

כמובן, יש לבחור את N_{HAM} , כלומר את מספר האיברים שבטור (9), בצורה כזאת שנבטיח התכנסות של הטור באופן הנדרש.

כמו כן, אופן בחירת הפרמטר \hbar תיבחן בהמשך.

ניסוח הבעיה המתמטית

כאמור במבוא, הבעיה בה נדון היא מתוך המאמר של קטושבסקי ועמיתיו [17]. בחלק זה אסביר על הבעיה כפי שנוסחה במאמר ואסכם את התוצאות העיקריות הרלוונטיות לדו"ח שהוצגו בו.

תיאור הבעיה

מטרת פרוייקט זה הינה למצוא פיתרון אנליטי מקורב לבעיה של התקבצות טיפות עם ה-HAM בשדה זרימה תונד מהצורה:

$$u^*(x^*, t^*) = U_a^* - U_b^* \sin(k^* x^* - \omega^* t^*) \quad (10)$$

כאשר הסימון העילי * מציין גודל מימדי, $u^*(x^*, t^*)$ זאת מהירות הזורם בזמן t^* ובמיקום x^* , U_a^* זאת מהירות הזורם הממוצעת, U_b^* זאת האמפליטודה של תנודות המהירות, k^* זה מספר הגל, ו- ω^* זאת המהירות הזוויתית. איבר שבלי אינדקס עליון * יציין פרמטר לא-מימדי.

ניתן להניח בלי הגבלת הכלליות ש- $U_a^*, U_b^* > 0$.

כדי לתאר את הבעיה במונחים של פרמטרים ריאליים, מניסויים עבור סילון אקסי-סימטרי מתקבל ש- $U_a^* > U_w^*$ כאשר U_w^* זאת מהירות התפשטות הגל.

נסתכל על זרימה חד-מימדית בכיוון x של חלקיק ספרי קטן שנע בשדה הזרימה המתואר במשוואה (10). נניח שהחלקיק כבד בהרבה מהזורם שנושא אותו, כלומר ש- $\frac{\rho_p^*}{\rho_f^*} \gg 1$, כאשר ρ_p^* ו- ρ_f^* הם צפיפות החלקיק והזורם, בהתאמה. במצב זה, כוחות ציפה, Basset, added mass, לחץ הם זניחים. בנוסף נניח גרביטציה.

לכן, תחת הנחה שמספר ריינולדס של החלקיק הוא בתחום כוח סטוקס, נקבל מהחוק השלישי של ניוטון את המשוואה הדיפרנציאלית:

$$-6\pi\mu^* r_p^* (\dot{v}^* - \dot{u}^*) = \frac{4\pi r_p^3}{3} \rho_p^* \dot{v}^* \quad (11)$$

כאשר $v^* = v^*(t^*)$ זאת מהירות החלקיק בזמן t^* , הסימן dot מציין גזירה בזמן, r_p^* רדיוס החלקיק ו- μ^* הצמיגות הדינמית של הזורם.

ומהגדרת $\tau_p^* = \frac{2\rho_p^* r_p^{*2}}{9\mu^*}$ שזה זמן התגובה של סטוקס (*the Stokes response time*), נוכל לרשום:

$$\dot{v}^* = \frac{1}{\tau_p^*} (u^* - v^*) \quad (12)$$

נגדיר פרמטרים לא מימדיים בצורה הבאה: $t = \frac{t^*}{t_c^*} = \omega^* t^*$, $x = \frac{x^*}{x_c^*} = k^* x^*$, ו- $\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{1}{u_c^*} \left(\frac{u^*}{v^*}\right)$ כאשר $u_c^* = U_w^* = \frac{x_c^*}{t_c^*} = \frac{\omega^*}{k^*}$.

נגדיר בנוסף גם את מספר סטוקס $St = \tau_p^* / t_c^*$ ונקבל שמשוואה (12) בצורתה הלא-מימדית היא:

$$\dot{v} = \frac{1}{St} (u - v) \quad (13)$$

ושהמשוואה של מהירות הזורם ממשוואה (8) הופכת להיות:

$$u(x, t) = U_a - U_b \sin(x - t) \quad (14)$$

מהירות התפשטות הגל הלא מימדית שווה לאחד, ולכן הקשר בין המהירות הממוצעת של הזורם לבין מהירות התפשטות הגל היא $U_a > 1$.

ממשוואות (12) ו- (13) ומשימוש בקשר $v = \dot{x}$ נקבל את המשוואה הדיפרנציאלית הבאה עבור תנועת החלקיק:

$$\ddot{x} + \frac{1}{St} \dot{x} + \frac{U_b}{St} \sin(x - t) = \frac{U_a}{St} \quad (14)$$

משוואה (14) מתארת תנועה חד מימדית של חלקיק קטן בשדה זרימה מחזורי המתואר במשוואה (10).

על מנת לקבל משוואה דיפרנציאלית עם מקדמים קבועים, נגדיר משתנה לא-מימדי $\theta = x - t$ ונחליף את פרמטר הזמן הלא-

מימדי במקום t להיות $\tau = \sqrt{\frac{U_b}{St}} \cdot t$ ונקבל שהמשוואה עבור תנועת החלקיק היא:

$$\theta'' + \alpha\theta' + \sin(\theta) = \beta \quad (16)$$

כאשר הסימן של ה- $(prime)$ מציינת גזירה לפי τ , וכמו כן α ו- β מוגדרים:

$$\alpha = 1/\sqrt{U_b St} \quad (17)$$

$$\beta = (U_a - 1)/U_b \quad (18)$$

מכיוון ש- $U_b > 0$ ומאי-השוויון $U_a > 1$, אז נקבל ש- $\beta > 0$, $\alpha > 0$, כלומר ממשיים חיוביים.

המשוואה הדיפרנציאלית אותה נפתור בהמשך בעזרת ה- HAM היא משוואה (16).

קטושבסקי ועמיתיו פתרו במאמרם [17] את משוואה (16) נומרית, כאשר עבור כל סט של פרמטרים U_a, U_b, St הם חישובו את תנועת החלקיק עבור 9 תנאי-התחלה שונים - $x(0) = k\frac{\pi}{4}$, $k = 0, 1, 2, \dots, 8$, ועם מהירות התחלתית של החלקיק ששווה למהירות הזרם באותו מיקום, כלומר $\dot{x}(0) = U_a - U_b \sin(x_0)$, כאשר $x_0 = x(0)$.

בהמשך הדו"ח אציג תוצאות נומריות מהמאמר [17] ואשווה אותן לתוצאות שאקבל בתוכנה $Mathematica$ עם שיטת ה- HAM .

תוצאות המאמר

אסכם כעת את תוצאות המאמר [17] רלוונטיות לדו"ח זה. לקריאה מעמיקה יותר מופנה הקורא למאמר [17].

מחקירות תיאורטיות ונומריות, התקבל שתנועת החלקיקים בזרימה נשלטת ע"י שני פרמטרים לא מימדיים - α ו- β , אשר מחושבים מהמאפיינים הפיזיקליים העיקריים: מהירות הזרם הממוצעת U_a , אמפליטודת תנודות המהירות U_b , ומספר סטוקס St (17), (18).

בנוסף, התקבל שכאשר $|\beta| < 1$ והחלקיקים קטנים מספיק, כלומר α מעל לערך מסויים $(\alpha \propto \frac{1}{St^{1/2}} \propto \frac{1}{\tau_p^{1/2}} \propto \frac{1}{r_p^*})$, כל החלקיקים נאספים במקבצים. דבר זה שקול לכך שעבור ערך קבוע של U_b , עלייה במספר סטוקס St מפחיתה את הסיכוי להתקבצות.

במקרה בו $|\beta|$ גדול מ-1 אבל רק במעט, בכל רגע נתון רק חלק מהחלקיקים עוברים התקבצות בעוד האחרים נעים בצורה נפרדת, ולכן פחות ניתן לאבחן התקבצות זו.

כמו כן, נמצא שעבור ערכים מסויימים במישור $\alpha - \beta$ החלקיקים נוטים להסתדר לשתי קבוצות. עבור β קבועה בתחום $\beta < 1$ שכאמור זה התחום בו התמקדו, אם מקטינים את α אז בנקודה מסויימת אנחנו מתחילים לקבל 3 קבוצות. הקטנה נוספת בערך של α תגרום למקרים של אי-התקבצות שבהם חלקיקים נעים בצורה נפרדת או שעוברים מקבוצה אחת לאחרת. באיור 4 במאמר [17] מוצגים שני איזורים - אחד שמסומן בתור "Grouping" שזה כאשר יש רק 2 קבוצות, ואיזור נוסף שמסומן בתור "Non-Grouping" שבו יכולות להיות יותר קבוצות או שהחלקיקים עוברים בין קבוצות. אם רוצים להבטיח התקבצות ולשלוט בה, תנאי ההפעלה צריכים להיות כאלו שיתאימו לאיזור ה-"Grouping". איור 4 במאמר [17] מצורף באיור 2 בדו"ח.

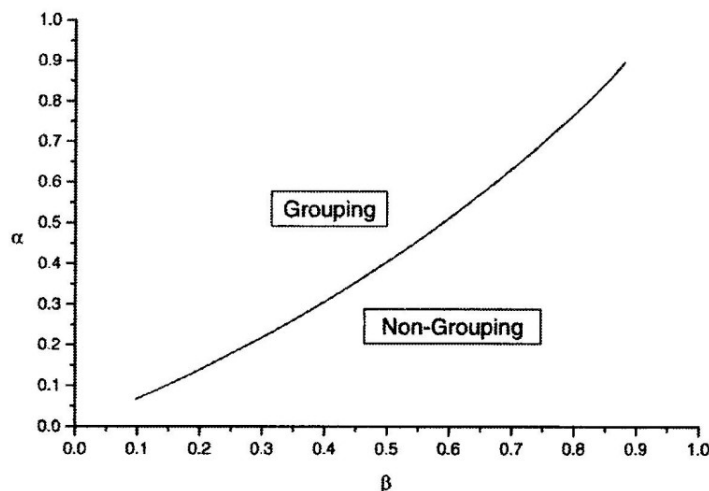


Fig. 4 The regimes of grouping and nongrouping in terms of the dimensionless parameters α and β . "Nongrouping" refers to the cases where there is splitting of groups and cases where particles move from one group to the other.

יישום ה-HAM בכבייה

איישם כעת את ה-HAM על משוואה (16) עם תנאי ההתחלה.

ראשית לשם נוחות, אחליף בין הפרמטר θ ל- V .

אנחנו רוצים לפתור את המד"ר:

$$V'' + \alpha V' + \sin V = \beta \quad (19)$$

כאשר $V = V(\tau)$:

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{U_b St}} \quad (17)$$

$$\beta = \frac{U_a - 1}{U_b} \quad (18)$$

נגדיר:

$$a \triangleq \frac{\pi}{4} k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 8 \quad (20)$$

$$b \triangleq \sqrt{\frac{St}{U_b}} (U_a - U_b \sin(a) - 1) \quad (21)$$

ולכן ת"ה יהיו:

$$V(\tau = 0) = a, \quad V'(\tau = 0) = b \quad (22)$$

ניישם כעת את שיטת ה-HAM על הבעיה הנתונה.

ראשית, נגדיר אופרטור לא-לינארי \mathcal{N} :

$$\mathcal{N}[\Phi(\tau; q)] = \frac{\partial^2 \Phi(\tau; q)}{\partial \tau^2} + \alpha \frac{\partial \Phi(\tau; q)}{\partial \tau} + \sin(\Phi(\tau; q)) - \beta \quad (23)$$

אשר מקיים את (1), ואופרטור עזר לינארי \mathcal{L} אשר מקיים:

$$\mathcal{L}[\Phi(\tau; q)] = \gamma_1(\tau) \frac{\partial^2 \Phi(\tau; q)}{\partial \tau^2} + \gamma_2(\tau) \frac{\partial \Phi(\tau; q)}{\partial \tau} + \gamma_3(\tau) \Phi(\tau; q) \quad (24)$$

כאשר $\gamma_1(\tau) \neq 0$.

נבנה את ההומוטופיה:

$$(1 - q)\mathcal{L}[\Phi(\tau; q) - V_0(\tau)] = \hbar q H(\tau) \mathcal{N}[\Phi(\tau; q)], \quad \tau \geq 0 \quad (2)$$

עם ת"ה:

$$\Phi(0; q) = a, \quad \Phi'(0; q) = b \quad (25)$$

נפתח את $\Phi(\tau; q)$ לטור חזקות לפי הפרמטר q :

$$\Phi(\tau; q) = V_0(\tau) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m(\tau) q^m \quad (3)$$

וכמו כן מתקיים ש:

$$V(\tau) = V_0(\tau) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m(\tau) \quad (5)$$

מהת"ה נקבל ש:

$$\Phi(0; q) = V_0(0) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m(0) q^m = a \quad (26)$$

$$\Phi'(0; q) = V_0'(0) + \sum_{m=1}^{+\infty} V_m'(0) q^m = b \quad (27)$$

ולכן מהשוואת מקדמים:

$$V_0(0) = a, \quad V_m(0) = 0 \quad \forall m \geq 1 \quad (28)$$

$$V_0'(0) = b, \quad V_m'(0) = 0 \quad \forall m \geq 1 \quad (29)$$

ה- mth-order deformation eq. שעלינו לפתור היא:

$$\mathcal{L}[V_m(\tau) - \chi_m V_{m-1}(\tau)] = \hbar H(\tau) R_m(\vec{V}_{m-1}), \quad m \geq 1 \quad (6)$$

כאשר:

$$\chi_m = \begin{cases} 0, & m \leq 1 \\ 1, & m > 1 \end{cases} \quad (7)$$

$$R_m(\vec{V}_{m-1}) = \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} \mathcal{N}[\phi(\tau; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \quad (8)$$

נבחר בסט הבא של פונקציות בסיס:

$$\{\tau^m \mid m = 0, 1, 2, \dots\} \quad (30)$$

ולכן:

$$V(\tau) = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m \tau^m \quad (31)$$

כאשר $c_m, m \geq 0$ קבועים כלשהם.

כדי ש- $V_0(\tau)$ תקיים את שני ת"ה נבחר אותה להיות:

$$V_0(\tau) = a + b \tau \quad (32)$$

ומבחירה זו כזאת כמובן מתקיים ש:

$$V(\tau=0) = a, \quad V'(\tau=0) = b \quad (22)$$

בתנאי חזקות הפוליונים של $V_m(\tau), m \geq 1$ יהיו 2 ומעלה. נדאג לוודא זאת בהמשך.

מתוך (24) (כאשר $\gamma_1(\tau) \neq 0$) ומהכלל של ה- *rule of solution expression* שאומר שצריך להתקיים ש- $\mathcal{L}[w(\tau)] = 0$ כאשר $w(\tau) = \sum_{n=0}^M d_n \tau^n$ הוא מקדם ו- M הוא מספר שלם ששווה לנגזרת הכי גבוהה במשוואה (כלומר במקרה שלנו $M=2$), לכן:

$$w(\tau) = d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2$$

וצריך להתקיים ש:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}[w(\tau)] &= \gamma_1(\tau) \frac{\partial^2 w(\tau)}{\partial \tau^2} + \gamma_2(\tau) \frac{\partial w(\tau)}{\partial \tau} + \gamma_3(\tau) w(\tau) \\ &= \gamma_1(\tau) \frac{\partial^2 (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2)}{\partial \tau^2} + \gamma_2(\tau) \frac{\partial (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2)}{\partial \tau} + \gamma_3(\tau) (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2) \\ &= \gamma_1(\tau) \cdot 2d_2 + \gamma_2(\tau) (d_1 + 2d_2 \tau) + \gamma_3(\tau) (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2)\end{aligned}$$

ומכיוון ש- $\mathcal{L}[w(\tau)] = 0$ אז:

$$\gamma_1(\tau) \cdot 2d_2 + \gamma_2(\tau) (d_1 + 2d_2 \tau) + \gamma_3(\tau) (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2) = 0$$

$$2d_2 + \frac{\gamma_2(\tau)}{\gamma_1(\tau)} (d_1 + 2d_2 \tau) + \frac{\gamma_3(\tau)}{\gamma_1(\tau)} (d_0 + d_1 \tau + d_2 \tau^2) = 0$$

עבור בחירה של:

$$\gamma_2(\tau) = \gamma_3(\tau) = 0, \quad \gamma_1(\tau) = 1$$

נקבל ש:

$$d_2 = 0 \Rightarrow \mathcal{L}(d_0 + d_1 \tau) = 0$$

כלומר:

$$\mathcal{L}[\Phi(\tau; q)] = \frac{\partial^2 \Phi(\tau; q)}{\partial \tau^2} \quad (33)$$

מהצבת (33) למשוואה (8):

$$\frac{\partial^2 (V_m(\tau) - \chi_m V_{m-1}(\tau))}{\partial \tau^2} = \hbar H(\tau) R_m(\vec{V}_{m-1})$$

נפתור ע"י 2 אינטגרציות:

$$V'_m(\tau) = \chi_m V'_{m-1}(\tau) + \int_0^\tau \hbar H(w) R_m(\vec{V}_{m-1}(w)) dw + C_{1,m}, \quad m \geq 1 \quad (34)$$

$$V_m(\tau) = \chi_m V_{m-1}(\tau) + \int_0^\tau \left[\int_0^z \hbar H(w) R_m(\vec{V}_{m-1}(w)) dw \right] dz + C_{1,m} \tau + C_{2,m}, \quad m \geq 1 \quad (35)$$

כאשר $C_{1,m}$ ו- $C_{2,m}$ הם קבועי האינטגרציה המתאימים לכל $m \geq 1$, שונה, ו- w ו- z הם dummy variables של האינטגרציות.

מהתנאים מצאנו במשוואה (29) נקבל ממשוואה (34) ש- $C_{1,m} = 0$ עבור $m \geq 1$.

ומהתנאים מצאנו במשוואה (28) נקבל ממשוואה (35) ש- $C_{2,m} = 0$ עבור $m \geq 1$.

לכן, קיבלנו בסך הכל שה- m th-order deformation eq. היא:

$$V_m(\tau) = \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left[\int_0^z H(w) R_m(\vec{V}_{m-1}(w)) dw \right] dz \quad (36)$$

תחת ה- *rule of solution expression*, עלינו לבחור את פונקציית העזר $H(\tau)$ שיהיה מהצורה הבאה:

$$H(\tau) = \tau^n, \quad n \geq 0 \quad (37)$$

נציין שמבחירת פונקציית הבסיס (30) וממשוואה (23), ומפיתוח הסינוס שיופיע באיבר (8) לאחר גזירה והצבת $q = 0$ לטור טיילור נקבל ש- $R_m(\vec{V}_{m-1}(w))$ הוא פולינום שהחזקה הכי נמוכה שלו היא 0, ומהערה שהזכרתי במשוואות (22), (32) נרצה לוודא שהחזקה הכי נמוכה של (36) תהיה 2, ולכן נרצה שהחזקה הכי נמוכה של הפולינום של האינטגרנד של (36) תהיה 0, ולכן נבחר $H(w) = 1$ ובכך אנו מבטיחים שהחזקה הכי נמוכה של (36) תהיה 2, דבר שיגרום לכך שת"ה יתקיימו וגם שהפיתרון יהיה שלם מהבחינה שלא תהיה חסרה בו שום חזקה של t , כלומר כל פונקציות הבסיס יופיעו בו (בפיתרון יופיעו כל החזקות של t).

נציב את (8) ואת (23) במשוואה (36) עבור $H(\tau) = 1$ ונקבל ש:

$$\begin{aligned}
V_m(\tau) &= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left[\int_0^z R_m(\vec{V}_{m-1}(w)) dw \right] dz = \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left[\int_0^z \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} \mathcal{N}[\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} dw \right] dz = \\
&= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left[\int_0^z \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} \left(\frac{\partial^2 \Phi(w; q)}{\partial w^2} + \alpha \frac{\partial \Phi(w; q)}{\partial w} - \beta + \sin(\Phi(w; q)) \right)}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} dw \right] dz = \\
&= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \frac{1}{(m-1)!} \hbar \int_0^\tau \left(\int_0^z \left\{ \frac{\partial^{m-1} \left[\frac{\partial^2 \Phi(w; q)}{\partial w^2} \right]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} + \alpha \frac{\partial^{m-1} \left[\frac{\partial \Phi(w; q)}{\partial w} \right]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} - \frac{\partial^{m-1} [\beta]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right) dz = \\
&= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left(\int_0^z \left\{ \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right] + \alpha \frac{\partial}{\partial w} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\beta]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} + \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right) dz = \\
&= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left(\int_0^z \left\{ \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial w^2} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right]}_{\substack{(4) \\ \cong V_{m-1}''(w)}} + \underbrace{\alpha \frac{\partial}{\partial w} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right]}_{\substack{(4) \\ \cong V_{m-1}'(w)}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \underbrace{\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\beta]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0}}_{\substack{(1 \text{ for } m=1 \\ 0 \text{ for } m>1)}} + \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right) dz = \\
&= \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left(\int_0^z \left\{ \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial w^2} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right]}_{\substack{(4) \\ \cong V_{m-1}''(w)}} + \underbrace{\alpha \frac{\partial}{\partial w} \left[\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\Phi(w; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right]}_{\substack{(4) \\ \cong V_{m-1}'(w)}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \underbrace{\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\beta]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0}}_{\substack{(7) \\ \cong \beta(1-\chi_m)}} + \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right) dz
\end{aligned}$$

כלומר קיבלנו שעבור $m \geq 1$:

(38)

$$V_m(\tau) = \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left(\int_0^z \left\{ V_{m-1}''(w) + \alpha V_{m-1}'(w) - \beta(1 - \chi_m) + \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right) dz$$

נרצה כעת לטפל באיבר:

$$\frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \quad (39)$$

ניעזר במשוואה (4):

$$V_m(w) = \frac{1}{m!} \left. \frac{\partial^m \Phi(w; q)}{\partial q^m} \right|_{q=0}, m \geq 0 \quad (4)$$

לשם הדוגמה נחשב את (39) עבור $m = 2$ ועבור $m = 4$ אנליטית באמצעות כלל השרשרת, ואחר כך נראה כיצד מקבלים בתוכנה Mathematica את האיברים הללו עבור הסדרים הגבוהים יותר.

הפרוצדורה של חישוב (39):

ראשית נגזור את $\sin(\Phi(w; q))$ (מ-1) פעמים לפי q כלל השרשרת, נצטרך לחשב הכל ב- $q = 0$ ולכן אחר כך נשתמש במשוואה (4), כלומר בכל מקום שיהיה לנו $\left. \frac{\partial^m \Phi(w; q)}{\partial q^m} \right|_{q=0}$ אז נציב במקומו $\frac{1}{m!} \cdot V_m(w)$. כתוצאה מכך נקבל שהארגומנט של

הסינוסים והקוסינוסים יהיה $V_0(w)$ ואז נפתח את $\sin(V_0(w))$ ואת $\cos(V_0(w))$ לטור טיילור, כפי שציניתי קודם לכן שאעשה (כדי שבפיתרון יהיו רק פולינומים). את טור הטיילור אפתח סביב נקודה כללית w_0 ואפתח עד לסדר N_{Taylor} . לשם כך ניזכר שפולינום

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^N f^{(n)}(x_0) \frac{(x-x_0)^n}{n!} \quad :x_0 \text{ סביב הנק'}$$

מטור טיילור נקבל ש:

$$\sin(V_0(w)) \approx \sum_{n=0}^{N_{Taylor}} \frac{\partial^n [\sin(V_0(w))]}{\partial w^n} \frac{(w-w_0)^n}{n!} \quad (40)$$

$$\cos(V_0(w)) \approx \sum_{n=0}^{N_{Taylor}} \frac{\partial^n [\cos(V_0(w))]}{\partial w^n} \frac{(w-w_0)^n}{n!} \quad (41)$$

נשים לב שבגזירה שבמשוואה (41) עלינו להשתמש בכלל השרשרת.

עבור $m = 2$:

(42)

$$\left. \frac{\partial [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q} \right|_{q=0} = \left[\cos(\Phi(w; q)) \cdot \left. \frac{\partial [\Phi(w; q)]}{\partial q} \right|_{q=0} \right] = \cos(\Phi(w; 0)) \cdot \left. \frac{\partial [\Phi(w; q)]}{\partial q} \right|_{q=0} = \cos(V_0(w)) \cdot V_1(w)$$

עבור $m = 4$:

(43)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3!} \left. \frac{\partial^3 [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^3} \right|_{q=0} = \\ & = \frac{1}{3!} \left[-\cos(\Phi(w; q)) \cdot \left(\frac{\partial [\Phi(w; q)]}{\partial q} \right)^3 - 3 \sin(\Phi(w; q)) \cdot \frac{\partial [\Phi(w; q)]}{\partial q} \frac{\partial^2 [\Phi(w; q)]}{\partial q^2} + \cos(\Phi(w; q)) \cdot \frac{\partial^3 [\Phi(w; q)]}{\partial q^3} \right] \Bigg|_{q=0} \\ & = \frac{1}{3!} \left[-\cos(V_0(w)) \cdot (V_1(w))^3 - 3 \sin(V_0(w)) \cdot V_1(w) 2V_2(w) + \cos(V_0(w)) \cdot 3! V_3(w) \right] = \\ & = \sin(V_0(w)) [-V_1(w) V_2(w)] + \frac{1}{3!} \cos(V_0(w)) [-(V_1(w))^3 + 3! V_3(w)] \end{aligned}$$

על מנת להקל על עצמנו לגזור איבר בעזרת כלל השרשרת, ניעזר בתוכנה Mathematica ונגזור בעזרתה, ולאחר מכן נמשיך את שאר הפרוצדורה כפי שפורטה למעלה.

שורת הקוד המתאימה בשביל לגזור את $(m-1) \sin(\Phi(w; q))$ פעמים לפי q ואז לאסוף איברים לפי $\sin(\Phi(w; q)), \cos(\Phi(w; q))$ היא:

`Collect[D[Sin[ϕ[w, q]], {q, m - 1}], {Sin[ϕ[w, q]], Cos[ϕ[w, q]]}, Simplify]`

נאמת זאת ע"י השוואה לשני המקרים שחושבו אנליטית קודם לכן - $m = 2, m = 4$.

עבור $m = 2$:

`In[1]:= m = 2;`

`Collect[D[Sin[ϕ[w, q]], {q, m - 1}], {Sin[ϕ[w, q]], Cos[ϕ[w, q]]}, Simplify]`

`Out[2]= Cos[ϕ[w, q]] ϕ(0,1)[w, q]`

כלומר קיבלנו:

$$\frac{\partial[\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q} = \cos(\Phi(w; q)) \cdot \frac{\partial[\Phi(w; q)]}{\partial q}$$

בדומה למה שקיבלנו במשוואה (42).

עבור $m = 4$:

`In[3]:= m = 4;`

`Collect[D[Sin[ϕ[w, q]], {q, m - 1}], {Sin[ϕ[w, q]], Cos[ϕ[w, q]]}, Simplify]`

`Out[4]= -3 Sin[ϕ[w, q]] ϕ(0,1)[w, q] ϕ(0,2)[w, q] + Cos[ϕ[w, q]] (-ϕ(0,1)[w, q]3 + ϕ(0,3)[w, q])`

כלומר קיבלנו:

$$\frac{\partial^3[\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^3} = -3 \sin(\Phi(w; q)) \cdot \frac{\partial[\Phi(w; q)]}{\partial q} \frac{\partial^2[\Phi(w; q)]}{\partial q^2} + \cos(\Phi(w; q)) \left[-\left(\frac{\partial[\Phi(w; q)]}{\partial q}\right)^3 + \frac{\partial^3[\Phi(w; q)]}{\partial q^3} \right]$$

בדומה למה שקיבלנו במשוואה (43).

כעת ניקח כדוגמה את המקרה בו $m = 7$:

`In[5]:= m = 7;`

`Collect[D[Sin[ϕ[w, q]], {q, m - 1}], {Sin[ϕ[w, q]], Cos[ϕ[w, q]]}, Simplify]`

`Out[6]= Sin[ϕ[w, q]] (-ϕ(0,1)[w, q]6 + 45 ϕ(0,1)[w, q]2 ϕ(0,2)[w, q]2 + 20 ϕ(0,1)[w, q]3 ϕ(0,3)[w, q] - 5 (2 ϕ(0,3)[w, q]2 + 3 ϕ(0,2)[w, q] ϕ(0,4)[w, q]) - 6 ϕ(0,1)[w, q] ϕ(0,5)[w, q]) + Cos[ϕ[w, q]] (15 ϕ(0,1)[w, q]4 ϕ(0,2)[w, q] - 15 ϕ(0,2)[w, q]3 - 60 ϕ(0,1)[w, q] ϕ(0,2)[w, q] ϕ(0,3)[w, q] - 15 ϕ(0,1)[w, q]2 ϕ(0,4)[w, q] + ϕ(0,6)[w, q])`

ונשתמש בתוצאה זו במהלך החישוב שנעשה, במקום לחשב את $\frac{\partial^6[\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^6}$ אנליטית עם כלל השרשרת.

לסיכום, נפתור את המשוואה:

$$V'' + \alpha V' + \sin V = \beta \quad (19)$$

עם ת"ה:

$$V(\tau = 0) = a, \quad V'(\tau = 0) = b \quad (22)$$

וניחוש התחלתי:

$$V_0(\tau) = a + b \tau \quad (32)$$

ונקבל את הפיתרון:

$$V(\tau) \approx \sum_{m=0}^{N_{HAM}} V_m(\tau) \quad (9)$$

כאשר $V_m(\tau)$:

(38)

$$V_m(\tau) = \chi_m V_{m-1}(\tau) + \hbar \int_0^\tau \left(\left[\int_0^z \left\{ V_{m-1}''(w) + \alpha V_{m-1}'(w) - \beta(1 - \chi_m) + \frac{1}{(m-1)!} \frac{\partial^{m-1} [\sin(\Phi(w; q))]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0} \right\} dw \right] \right) dz$$

והאיבר (39) מחושב לפי הפרוצדורה שפורטה שלעיל.

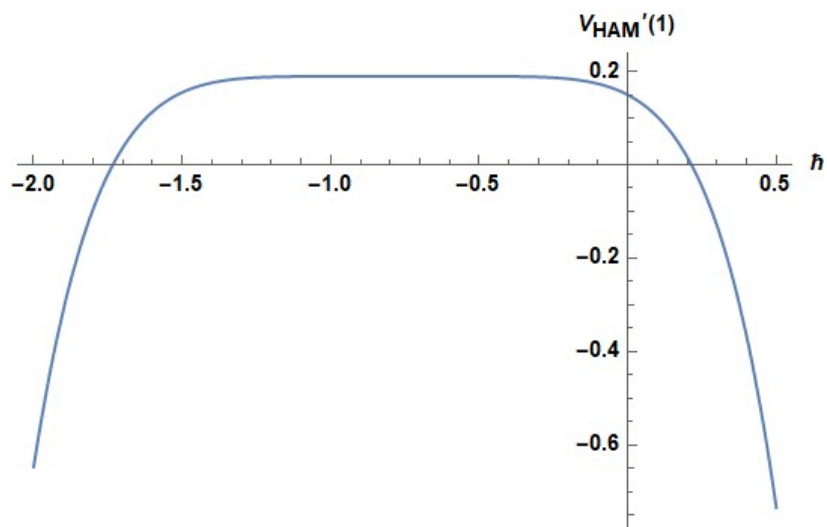
נדון כעת בשאר הפרמטרים שטרם נקבעו.

ראשית, נדרש לציין שהמטרה הייתה למצוא פיתרון שהוא אנליטי שיהווה קירוב טוב עבור המשוואה, זאת כדי להשתמש בעתיד בשיטת אופטימיזציה. מפונקציות הבסיס שנבחרו ומהתנהגות הפיתרון אז נקבל שלאחר τ מסויים הקירוב באמצעות HAM לא יתאר עוד את התנהגות הפיתרון (ככל ש- N_{HAM} גדול יותר כך הקירוב יהיה טוב יותר ולמשך זמן גדול יותר, אך הגדלת N_{HAM} מצריכה יותר זמן חישוב). לשם כך בחרנו לעבוד עם $V(\tau)$ למקוטעין, כך שעבור כל $\Delta\tau = 1$ פתרנו את הבעיה מחדש עם ת"ה על הפונקציה ועל הנגזרת מתוך הפיתרון של ה- τ הקודם, וכך הבטחנו רציפות בפונקציה ובנגזרת. מבחירת פונקציות הבסיס כפולינומים, נקבל שבפיתרון יופיעו חזקות גבוהות (בכל אינטרוול של פיתרון פולינומים ממעלה של 200!, זאת גם כתלות ב- N_{HAM} , ולכן לא ניתן יהיה לצרף את הקירוב האנליטי בדו"ח, אך הפיתרון האנליטי המקורב קיים ושומר בפרמטר שבו חושב בתוכנה *Mathematica*. מבחירה שונה של פונקציות בסיס ובחירה שונה של פונקציית העזר, ניחוש ההתחלתי ואופרטור העזר (כאמור יש לנו חופש רחב בשיטה לבחירת כל אלה), ייתכן וניתן היה לקבל פיתרון אנליטי מקורב עם ביטוי עם מספר איברים בודד בלבד ולהציג אותו בדו"ח, אך לצורך מטרת הפרוייקט ניסיון למצוא בחירות כאלה לא היה נחוץ. מסיבות אלו, ניתן להניח שגם שיטות פרטובציה שונות יכולות לענות על הצרכים הללו אם נפתור בצורה דומה ולמקוטעין, אך כפי שהוזכר במבוא, שיטת ה-HAM היא כללית יותר וכוללת בתוכה גם שיטות פרטובציה. בקוד $V(\tau)$ חושב כאילו ת"ה החדשים הם ב- $\tau = 0$, ולאחר שמקבלים פיתרון אז עושים לפונקצייה הזזה מתאימה בציר האופקי ולכן הפיתרון בקטע $[\tau_0, \tau_0 + 1]$ יהיה מהצורה $V_{\tau_0}(\tau) \approx \sum_{m=0}^n c_m (\tau - \tau_0)^m$. יש להיזהר מפתיחת סוגריים, שכן החזקות גבוהות ולתוכנה תהיה בעיה לפתוח חזקות גבוהות בצורה טובה ולאסוף איברים לפי חזקות של τ בלבד (ולא של $\tau - \tau_0$).

נדון כעת בפרמטר w_0 . את w_0 שזוהי הנקודה סביבה מפתחים את טור הטיילור של $\sin(V_0(w))$ ושל $\cos(V_0(w))$ שבמשוואות (40), (41) נבחר להיות $w_0 = 0$. תחילה היה רצון לבחור את w_0 להיות שווה כל פעם לערך של הפונקציה באותו התחלת האינטרוול אך כנראה בתוכנה *Mathematica* הייתה בעיה בלעבוד עם איברים מהצורה $w - w_0$ בפתיחת הסוגריים בסדרים גבוהים, שם התקבל שהפיתרון "התפוצץ" לעומת הפיתרון הנומרי, כלומר שהשגיאה גדלה בצורה משמעותית (על אף שתיאורטית הם אמורים להתאים טוב), זאת לעומת הבחירה של $w_0 = 0$ שם הקירוב האנליטי באמצעות שיטת ה-HAM התאים טוב לפיתרון הנומרי, כפי שניתן יהיה להתרשם בהמשך. מספר האיברים שחושבו בטור הטיילור נבחר להיות $N_{Taylor} = 20$.

בנוסף, תחום ההתכנסות של הפיתרון תלוי בערך של \hbar , כלומר ניתן לשלוט על תחום ההתכנסות עם פרמטר העזר \hbar . זהו כלי העזר העיקרי מבדיל בין ה-HAM לבין שיטות אנליטיות אחרות. נציין שאת \hbar ניתן להשאיר בתור נעלם בלתי ידוע בפיתרון כאשר נפתור בתוכנה Mathematica (או בתוכנה Maple או בכל תוכנה מתאימה אחרת) ולבחור את הערך שלו כך ש"השגיאה הנמדדת", כלומר שה- residual sum of squares (RSS) יהיה מינימלי [18]. כמו כן, כפי שצויין ב-[7], הערכים הקבילים עבור פרמטר העזר \hbar הם ערכים שנמצאים על הקטע האופקי של מה שמכונה " \hbar -curve" שבו פרמטר העזר \hbar הוא המשתנה התלוי ופרמטר המייצג מאפיין פיזיקלי מסויים של הבעיה שהוא המשתנה הבלתי תלוי. במאמר [20] Abbasbandy ועמיתיו ניתחו את הפרמטר \hbar ואת תכונת הקו האופקי בהרחבה.

ניקח דוגמה ל- \hbar -curve בכך שנצייר את $V'(\tau = 1)$ כתלות ב- \hbar עבור הת"ה $a = \frac{3\pi}{4}$ והפרמטרים $U_a = 1.5, U_b = 0.55, St = 1$, כפי שניתן לראות באיור 3:



איור 3: \hbar -curve של $V'(\tau = 1)$ עבור $U_a = 1.5, U_b = 0.55, St = 1$, $a = \frac{3\pi}{4}$ עם $N_{HAM} = 6$

הקוד בתוכנה Mathematica עבור איור 3 מצורף בנספח B.

מאיור 3 ניתן להבחין ש- \hbar האופטימלי הוא בסביבת -1, ומתוך הרצה של כמה ערכים אפשריים של \hbar שקבילים בסביבה הוחלט על $\hbar = -1$, משום שהוא המקרה הפשוט יותר וגם משום שברוב ההרצות התקבל עם $\hbar = -1$ פיתרון מדויק יותר לעומת \hbar אחרים.

ניתוח תוצאות HAM

בחלק זה נשווה בין התוצאות הנומריות במאמר [17] לבין הפיתרון האנליטי המקורב בעזרת שיטת ה-HAM.

בשביל להציג את איורים 2,3 שבמאמר [17] בצורה קריאה יותר מכפי שמופיעות בו אשר אותם נצטרך לשם השוואה בין הגרפים, בדו"ח זה יצורפו התוצאות הנומריות מהתוכנה Mathematica בה הפיתרון הנומרי בעזרת שיטת Runge Kutta הקלאסית (סדר 4) עם צעד של 10^{-4} .

בעזרת Mathematica קיבלנו פיתרון אנליטי מקורב לבעיה שאנו פותרים. משיטת ה-HAM קיבלנו את $V(\tau)$ (שכאמור זה $\theta(\tau)$) ובאיורים הבאים אציג את הפיתרון של $x(t)$ שכן זה הפיתרון אשר הוצג במאמר [17], כלומר נציג את מיקום החלקיק הלא-מימדי כתלות בזמן הלא-מימדי, זאת באמצעות הצבת $\tau = \sqrt{\frac{U_b}{St}} \cdot t$ והחלפת המשתנים $x = V + t$. כלומר מתוך הפיתרון המקורב $V_{HAM}(\tau)$ באמצעות שיטת ה-HAM נוכל לקבל את $x_{HAM}(t)$ שזה המיקום של החלקיק בזמן t שמתקבל משימוש בשיטת ה-HAM.

$$x(t) = V \left(\sqrt{\frac{U_b}{St}} \cdot t \right) + t \quad (44)$$

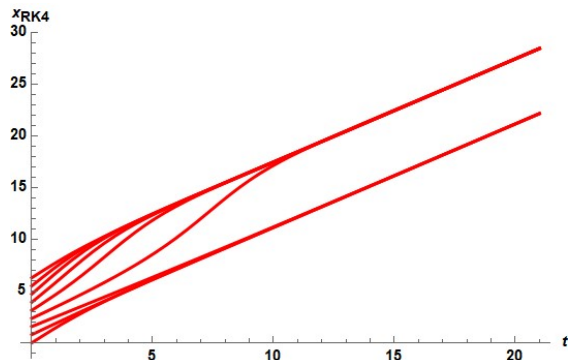
את המיקום של החלקיק בזמן t שקיבלנו מהרצה נומרית של רונגה קוטה מסדר 4 נסמן בתור $x_{RK4}(t)$.

כל הגרפים שחושבו בחלק זה הם מהתוכנה Mathematica, כאשר כל סט של גרפים מתאר פרמטרים שונים כפי שהוצגו במאמר [17]. הגרף הכחול מתאר את $x_{HAM}(t)$ עבור תשעת ת"ה השונים, האדום את $x_{RK4}(t)$ והכתום את "השגיאה", כלומר את ההפרש ביניהם $x_{RK4}(t) - x_{HAM}(t)$. יש להדגיש שזוהי אינה תהיה השגיאה בין שיטת ה-HAM לבין הפיתרון המדוייק של הבעיה, שכן גם הפיתרון הנומרי אליו מושווה הקירוב בשיטת HAM הוא קירוב לפיתרון המדוייק. הגרף הסגול הוא $V_{HAM}(\tau)$, כלומר לפני המעבר שבמשוואה (44).

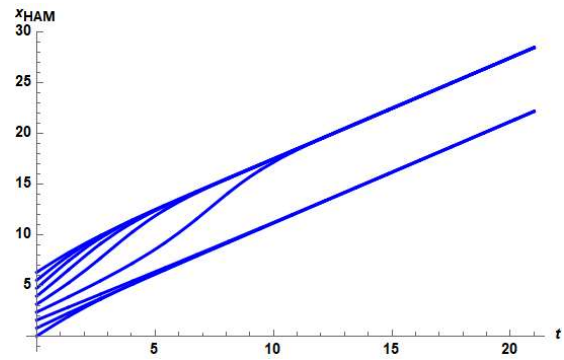
בנספח A מצורף הקוד בו חושב הקירוב של $V_{HAM}(\tau)$ וממנו $x_{HAM}(t)$ לפי משוואה (44) וגם הגרפים שבאיור 4. זהו למעשה הקוד העיקרי בפרוייקט, שבעזרתו מיושמת שיטת ה-HAM. ניתן גם מהקוד לקבל את גרפים 7 – 5 באמצעות שינוי של הפרמטרים U_a, U_b, St ושינוי זמן ההרצה כפי שנבחר. ניתן לשנות גם את N_{HAM} הסדר של הקירוב של $V(\tau)$ שבמשוואה (9), את N_{Taylor} שבמשוואות (41), (40) או את הפיתרון הנומרי.

נסתכל תחילה על האיורים שבגרף 2 שבמאמר [17]. הפרמטרים של גרף זה הינם $U_a = 1.5, U_b = 0.55$ $|\beta| < 1$ ממשוואה (18) ונבדקו שני ערכים של St : $St = 1$ (איור 4) ו- $St = 10$ (איור 5).

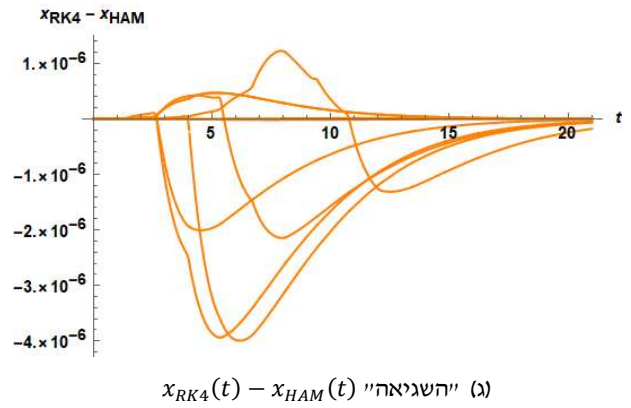
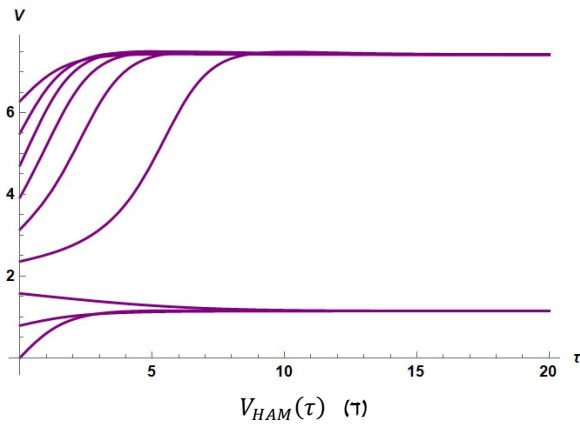
עבור $St = 1$:



(ב) הפיתרון הנומרי $x_{RK4}(t)$

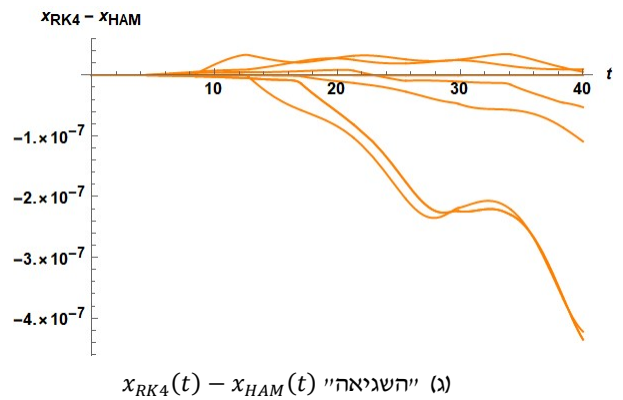
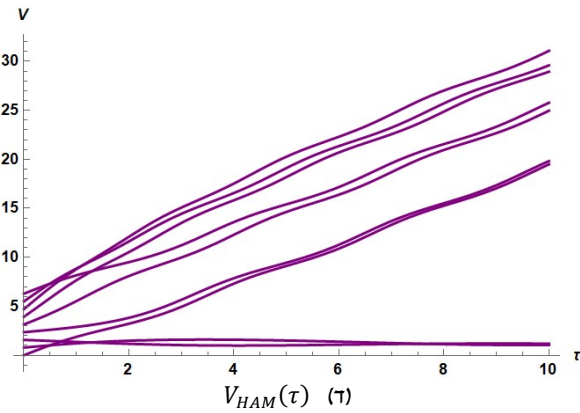
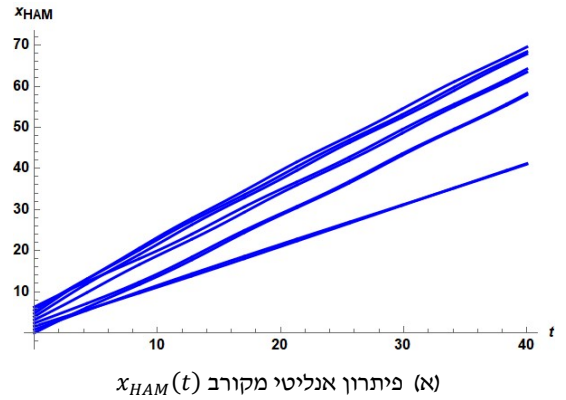
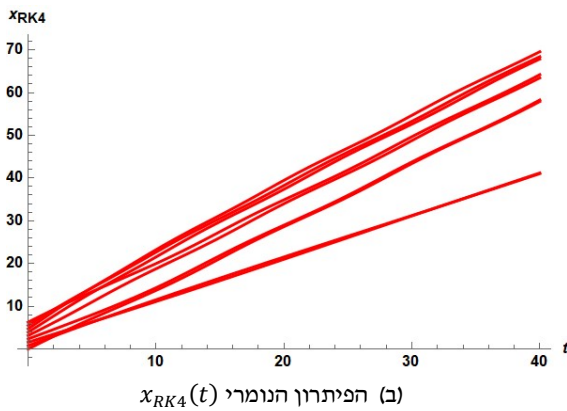


(א) פיתרון אנליטי מקורב $x_{HAM}(t)$



איור 4: איור 2(a) במאמר [17]. תנועת החלקיקים במקרה בו $|\beta| < 1$. ערכי הפרמטרים $U_a = 1.5, U_b = 0.55, St = 1$.

עבור $St = 10$:

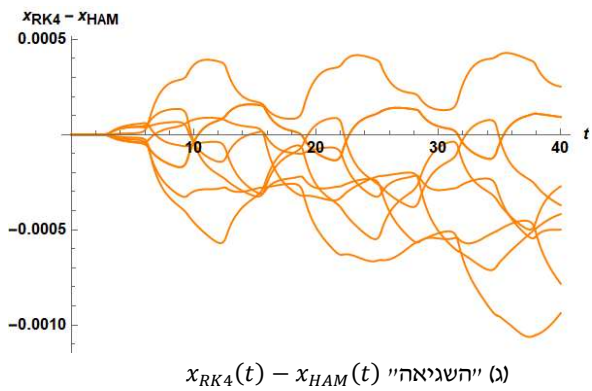
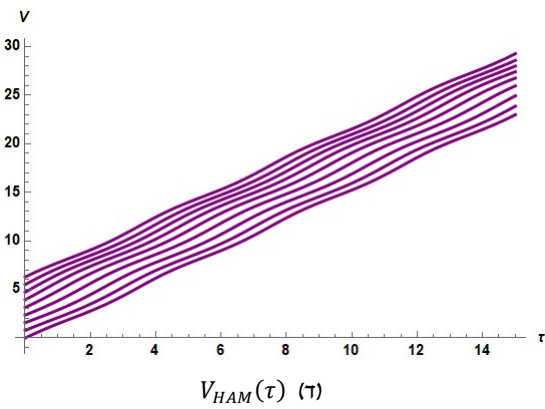
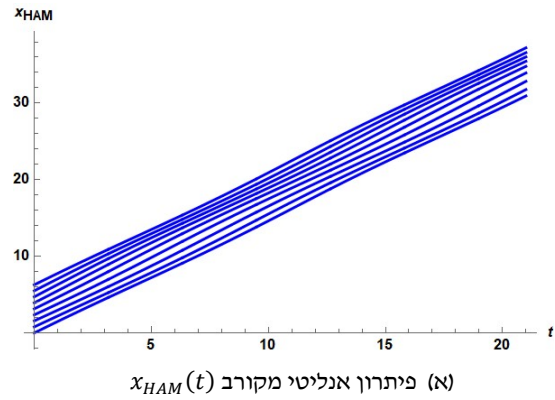
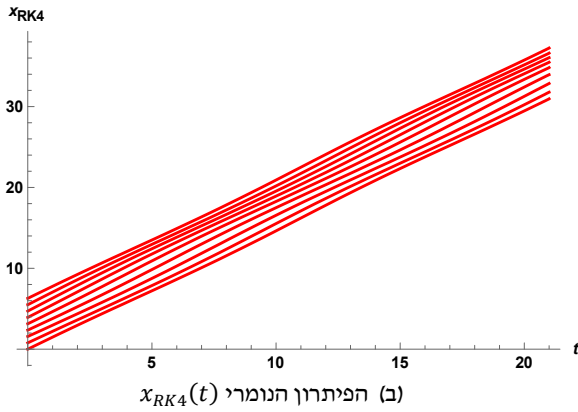


איור 5: איור 2(b) במאמר [17]. תנועת החלקיקים במקרה בו $|\beta| < 1$. ערכי הפרמטרים $U_a = 1.5, U_b = 0.55, St = 10$.

לכן נוכל להסיק מאיורים 4,5 קיבלנו שהתוצאות באמצעות שיטת ה-HAM תואמות לתיאוריה ולתוצאות הנומטריות שבמאמר [17]. קיבלנו שבהתאם לתיאוריה, עבור $|\beta| < 1$ קיימת נקודת ש"מ יציבה אחת עבור חלקיקים קטנים מספיק (כאשר כאמור הגודל של החלקיק משתקף במספר סטוקס St ובהתאם לכך גם ב- α : $\alpha \uparrow \Leftrightarrow St \downarrow \Leftrightarrow r_p^* \downarrow$), זאת לעומת חלקיקים גדולים מדי. באיור 4, שמתאים לחלקיקים קטנים, מקבלים התקבצות לשתי קבוצות, בעוד שבאיור 5 שמתאים לחלקיקים גדולים יותר אין התקבצות.

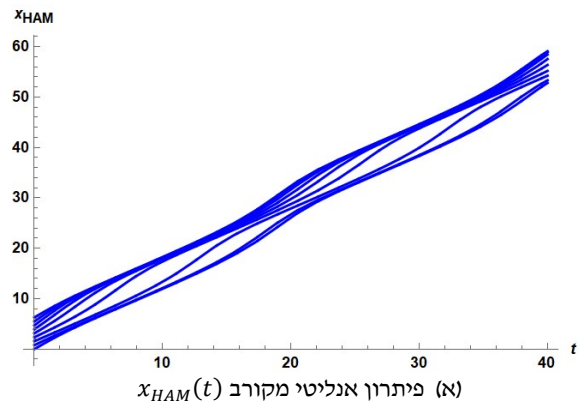
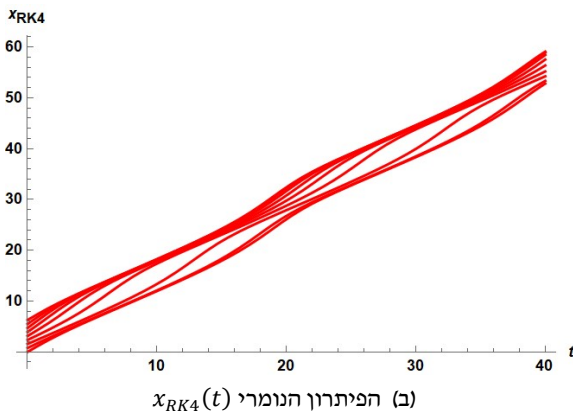
וכעת נשווה את התוצאות באמצעות שיטת HAM לגרף 3 שבמאמר [17]. הפרמטרים בגרף זה היו $U_a = 1.5$, $St = 1$ וצורפו שני מקרים של U_b : $U_b = 0.1$, $U_b = 0.4$. בשני המקרים $|\beta| > 1$.

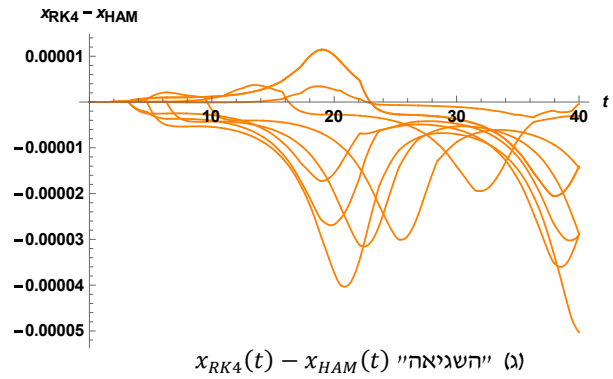
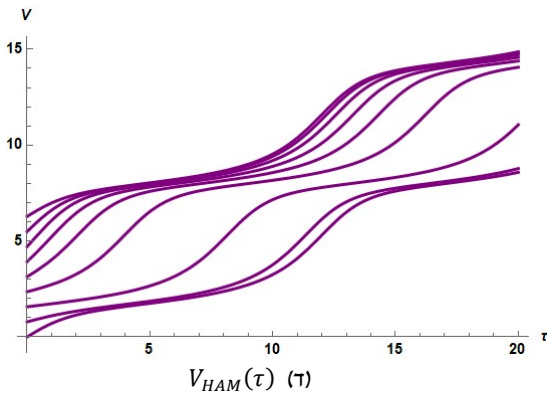
עבור $U_b = 0.1$:



איור 6: איור 3(a) במאמר [17]. תנועת החלקיקים במקרה בו $|\beta| > 1$. ערכי הפרמטרים $U_a = 1.5$, $St = 1$, $U_b = 0.1$.

עבור $U_b = 0.4$:





איור 7: איור 3(b) במאמר [17]. תנועת החלקיקים במקרה בו $|\beta| > 1$. ערכי הפרמטרים $U_a = 1.5, St = 1, U_b = 0.4$.

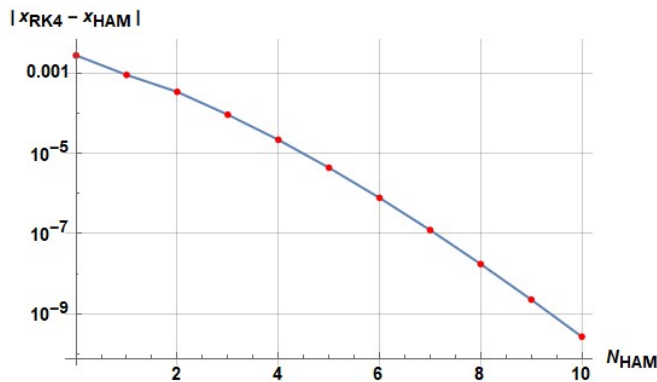
גם מאיורים 6,7 אשר מתארים מקרה בו $|\beta| > 1$, קיבלנו שהתוצאות באמצעות שיטת ה-HAM תואמות לתיאוריה ולתוצאות הנומריות שבמאמר [17]. קיבלנו בשני המקרים אין נקודת ש"מ. באיור 6 החלקיקים נעים בצורה נפרדת, כלומר אין התקבצות. כמו כן, כפי שהזכרנו, במקרים מיוחדים מספר חלקיקים יכולים להתאסף יחדיו לזמן מה וזה מתרחש עבור $|U_a - 1| \approx U_b$, כלומר עבור $\beta \approx 1$. ניתן לשים לב לתופעה זו באיור 7, ומתקיים עבור איור זה ש: $\beta = \frac{0.5}{0.4} = 1.25 \approx 1$. בניגוד למקרה בו $|\beta| < 1$, באיור 7 בכל רגע נתון רק חלק מהחלקיקים עוברים התקבצות בעוד האחרים נעים בצורה נפרדת, ולכן כפי שהוזכר במאמר פחות ניתן לאבחן בהתקבצות זו.

דיון כעת בשגיאה.

הפיתרון הנומרי שבחרנו הוא רונגה-קוטה מסדר 4 (RK4), ועבור צעד של h מקבלים משיטה זו ששגיאה הקטיוע המקומית היא מסדר גודל של $\sigma(h^5)$ בעוד שהשגיאה הנצברת הכוללת היא מסדר גודל של $\sigma(h^4)$. לכן נסיק שמבחירה של $h = 10^{-4}$ נוכל להגיד שהשוואה בין הפיתרון לפי שיטת HAM לעומת הפיתרון הנומרי היא כמו להשוות את ה-HAM לפיתרון המדוייק, עבור השגיאות באיורים 4(ג) - 7(ג). כמו כן, ניתן לומר זאת כי בנייתוח שגיאות אנו מתעניינים בשגיאה המקסימלית.

מאיורים 4(א, ב) - 7(א, ב) נבחין שהתנהגות הפיתרון שקיבלנו בעזרת שיטת ה-HAM דומה להתנהגות הפיתרון הנומרי. בנוסף, מאיורים 4(ג) - 7(ג) נסיק שהשגיאה בין השניים יכולה לגדול עם הזמן כתלות בהתנהגות הפיתרון, כפי שבאיור 7, ויכולה לדעוך כפי שבאיור 4.

גרפים 4-7 חושבו עבור $N_{HAM} = 10$ שזהו סדר הקירוב של $V(\tau)$ כפי שמופיע במשוואה (9). ננתח כעת את השפעת N_{HAM} , כאשר הציפייה היא כמובן למגמה שתצביע שבאופן כללי כאשר N_{HAM} גדול יותר אז הקירוב יהיה טוב יותר. לשם כך, נבחר עקום זמן, ונראה כיצד N_{HAM} משפיע על השגיאה בין הפיתרון המתקבל בשיטת HAM לבין הפיתרון הנומרי באותה נקודה. גרף זה מצורף באיור 8, בו חושבה "השגיאה" עבור הפרמטרים שבאיור 4, כלומר $U_a = 1.5, U_b = 0.55, St = 1$, עבור לת"ה $x_0 = \frac{\pi}{2}$ ($k = 2$) ובשנייה $t = 3$. כלומר באיור 8 מוצג $|x_{RK}(3) - x_{HAM}(3)|$ כפונקציה של N_{HAM} בסקאלה לוגריתמית.



איור 8: גודל "השגיאה" בזמן $t = 3$ עבור הנתונים שבאיור 4 - $k = 2$ כתלות ב- N_{HAM} .

הקוד בתוכנה Mathematica עבור איור 8 מצורף בנספח C.

מאיור 8 קיבלנו את מה שציפינו לו, שכאשר מגדילים את מספר האיברים שלוקחים בטור שבמשוואה (9) בשיטת HAM כך השגיאה קטנה בערכה המוחלט.

יש לציין שניתן שהשגיאה המתוארת באיור 8 היא לאחר הטרנספורמציה $t = \sqrt{\frac{U_b}{St}} \cdot t$. כמו כן, מתוך $x(t) = V(t) + t$ מתקיים ש- $x_{RK4} - x_{HAM} = v_{RK4} - v_{HAM}$ ולכן הגרף שבאיור 8 מתאר את השגיאה הישירה של שיטת ההומוטופיה לעומת הפיתרון הנומרי, כלומר הגרף עבור $v_{RK4}(\tau) - v_{HAM}(\tau)$ יהיה כמו איור 8 עם אותם ערכי שגיאה בציר האנכי אך עבור $\tau = 3 \sqrt{\frac{U_b}{St}}$, ולכן האיורים הנ"ל אקוויולנטים לשם בחינת שגיאת הפיתרון בשיטת HAM כפי שיושם בפרוייקט זה עבור הבעיה הנתונה.

מחקר עתידי לפרוייקט

כהמשך לפרוייקט זה, נדרש להוסיף למודל המתמטי החד-מימדי שפותח במאמר [17] הפרעה של גל אקוסטי, כלומר מנגנון שמבוסס על שילוב של זרימה וגלים אקוסטיים כדי ליצור חלקיקים גדולים יותר שניתן יהיה ללכוד על-ידי המסנן, ולפתור את המודל המתמטי החדש באמצעות שיטת ה-HAM, כמו גם לפתור אותו נומרית ולהשוות בין התוצאות.

בנוסף נדרש לאחר מכן ליישם את שיטת האלגוריתם הגנטי שזוהי שיטת אופטימיזציה באמצעותה ניתן להשיג את התנאים הפרמטרים הטובים ביותר בשביל התקבצות חלקיקים, כך שמערכת הסינון לטיהור האוויר תהיה יעילה יותר בלכידת החלקיקים המוגדלים.

סיכום

בעבודה עם תרסיסי דלק קיימת חשיבות רבה לתהליך האטומיזציה שזהו תהליך פירוק טיפות הדלק לטיפות קטנות יותר. עקב פירוק הטיפות לטיפות קטנות יותר גדל שטח הפנים של הטיפות וכתוצאה מכך האינדוקס מהיר יותר, הדלק נשרף מהר יותר ומשחרר יותר חום. עם זאת במקרים רבים, כפי שפורט במבוא, בעבודה עם תרסיסים תהליך ההתקבצות הינו תהליך רצוי לשם הפחתת התופעות המזיקות של הננו-חלקיקים.

בפרוייקט נבחנה שיטת ה-HAM שהיא שיטה אנליטית למציאת פיתרון מקורב לבעיה לא-ליניארית. מהשוואת הפיתרון המקורב שמתקבל בעזרת ה-HAM לפתרונות נומריים מתוך הספרות לבעיית התקבצות חלקיקים בשדה זרימה תונד [17] קיבלנו שהפיתרון האנליטי מהווה קירוב טוב לפיתרון הנומרי, ולכן מהווה קירוב טוב לפיתרון המדוייק. כמו כן, למדנו על היתרונות של שיטת ה-HAM לעומת שיטות אחרות ועל החופש הרב הקיים בשיטה זו.

- [1] N. Zhu, D. Zhang, W. Wang, X. Li, B. Yang, J. Sing, X. Zhao, B. Huang, W. Shi, R. Lu, et al., "A Novel Coronavirus from Patients with Pneumonia in China", *N. Engl. J. Med.* 382, 727-733, 2020.
- [2] EPA, "Residential air cleaners: A technical summary", 3rd Ed. Portable air cleaners furnace and HVAC filters, 2018.
- [3] D. Katoshevski, "Characteristics of Spray Grouping/Non-Grouping Behavior", *Aerosol and Air Quality Research* 6, 54-66, 2006.
- [4] D. Katoshevski, M. Ruzal, T. Shakked, E. Sher "Particle grouping, a new method for reducing emission of submicron particles from diesel engines", *Fuel* 89, 2411-2416, 2010.
- [5] J.B. Greenberg, "Manipulating the Dynamics of Sub-Micron/Nano Particles for Air Purification via a Combination of oscillatory Flow and Acoustic Waves using Genetic Algorithm Optimization", Detailed description of the research program, 2021.
- [6] S.J. Liao, "The proposed homotopy analysis technique for the solution of nonlinear problems", PhD thesis. 1992.
- [7] S.J. Liao, "Beyond Perturbation: Introduction to Homotopy Analysis Method", CRC Press, Boca Raton: Champan Hall, 2003.
- [8] S.J. Liao, "Comparison between the homotopy analysis method and homotopy perturbation method", *Appl. Math. Comput.* 169, 1186-1194, 2005.
- [9] A.K. Alomari, M.S.M. Noorani, and R. Nazar, "Comparsion between the homotopy analysis method and homotopy perturbation method to solve coupled Schrodinger-KdV equation", *Appl. Math. Comput.* 31, 1-12, 2009.
- [10] S. Abbasbandy, "The application of the homotopy analysis method to nonlinear equations arising in heat transfer", *Phys. Lett. A* 360, 109-113, 2006.
- [11] Y. Chen, and J. Liu, "Uniformly valid solution of limit cycle of the Duffing Van der Pol equation", *Mech. Res. Commun.* 36, 845-850, 2009.
- [12] S.P. Zhu, "An exact and explicit solution for the valuation of American put options", *Quantitative Finance* 6, 229-242, 2006.
- [13] M. Turkyilmazoglu, "Purely analytic solutions of the compressible boundary layer flow due to a porous rotating disk with heat transfer", *Phys. Fluids* 21, 106-104, 2009.
- [14] G. Zhang, and Z. Wu, "Homotopy analysis method for approximations of Duffing oscillator with dual frequency excitations", *Chaos, Solit. Fract.* 127, 342-353, 2019.
- [15] A. Mastroberardino, "Homotopy analysis method applied to electrohydrodynamic flow", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 16, 2730-2736, 2011.
- [16] C.J. Nassar, J.F. Revelli, R.J. Bowman, "Application of the homotopy analysis method to the Poisson-Boltzmann equation for semiconductor devices", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 16, 2501-2736, 2512.
- [17] D. Katoshevski, Z. Dodin, and G. Ziskind, "Aerosol clustering in oscillating flows: mathematical analysis", *Atomization and Sprays* 15, 401-412, 2005.
- [18] S.J. Liao, "Homotopy Analysis Method in Nonlinear Differential Equations", Higher Education Press, Beijing, 2012.

- [19] S.J. Liao, "*Advances in the Homotopy Analysis Method*", World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Shanghai, 2013.
- [20] S. Abbasbandy, E. Shivanian, and K. Vajravelu, "*Mathematical properties of \hbar – curve in the frame work of the homotopy analysis method*", Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 16, 4268-4275, 2011.

נספחים

- נספח A – הקוד העיקרי לגרפים. הקוד לאיור 4.
- נספח B – \dot{h} – curve – הקוד לאיור 3.
- נספח C – השגיאה כתלות ב- N_{HAM} . הקוד לאיור 8.