

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Simulação Numérica de uma Equação de Schrödinger Não Linear em Domínio Não-Cilíndrico

Daniele C. R. Gomes¹

Mauro Antonio Rincon²

PPGI-Programa de Pós-Graduação em Informática, NCE/IM, UFRJ, RJ, Brasil

Maria Darci G. da Silva³

Departamento de Matemática e Estatística, UFRJ, RJ, Brasil

Gladson O. Antunes⁴

Departamento de Matemática e Estatística, UNIRIO, RJ, Brasil

Resumo. Estudamos neste trabalho os aspectos matemáticos e numéricos de uma equação de Schrödinger não linear em domínio não-cilíndrico para o caso unidimensional. Uma mudança da variável permitirá transformar o problema em estudo em um equivalente, com domínio cilíndrico, permitindo obter a existência e a unicidade da solução utilizando o método de Galerkin e resultados de compacidade. Vamos aplicar o método dos elementos finitos no espaço associado e o método de diferenças finitas na parte temporal, para obter uma solução numérica aproximada. O sistema não linear resultante será resolvido pelo método de Newton. Além disso, faremos uma análise da taxa de convergência dos métodos aplicados.

Palavras-chave. Equação de Schrödinger, Domínio Não-Cilíndrico, Método de Newton, Simulação Numérica.

1 Introdução

Sejam $\alpha(t)$, $\beta(t)$ funções reais definidas sobre os números reais não negativos $[0, \infty)$, com $\beta(t) > \alpha(t)$ para todo $t \geq 0$. Para cada $t \in [0, T]$, T um número real positivo, consideramos os subconjuntos $\Omega_t = \{x \in \mathbb{R}; \alpha(t) < x < \beta(t)\} \subset \mathbb{R}$. Denotaremos \widehat{Q} o domínio não cilíndrico \mathbb{R}^2 definido por

$$\widehat{Q} = \bigcup_{0 < t < T} \{\Omega_t \times \{t\}\}$$

com fronteira lateral regular $\widehat{\Sigma} = \bigcup_{0 < t < T} \{\Gamma_t \times \{t\}\}$, em que $\Gamma_t = \{\alpha(t), \beta(t)\}$.

¹daniele.rocha@ppgi.ufrj.br

²rincon@dcc.im.ufrj.br

³darci@im.ufrj.br

⁴gladson.antunes@uniriotec.br

Nesse trabalho consideramos a seguinte equação de Schrödinger não linear

$$\begin{cases} u' - i\Delta u + |u|^\rho u = \widehat{f}, \quad \forall (x, t) \text{ em } \widehat{Q}, \\ u = 0 \text{ em } \widehat{\Sigma}, \\ u(x, 0) = u_0(x) \text{ em } \Omega_0. \end{cases} \quad (i^2 = -1) \quad (1)$$

A metodologia empregada no estudo do problema (1) consiste, inicialmente, em transformá-lo em um problema definido em um domínio cilíndrico. Para isto observamos que, quando (x, t) varia em \widehat{Q} o ponto (y, t) , com $y = (2x - \alpha(t) - \beta(t))/\gamma(t)$, em que $\gamma(t) = \beta(t) - \alpha(t)$, varia no cilindro $Q = (-1, 1) \times (0, T)$. A partir daí consideramos o Difeomorfismo $\tau : \widehat{Q} \rightarrow Q$, definido por $\mathcal{T}(x, t) = \left(\frac{2x - \alpha(t) - \beta(t)}{\gamma(t)}, t \right)$. Dessa forma, a mudança de variável $u(x, t) = v(y, t)$ transforma o problema (1) no seguinte problema equivalente

$$\begin{cases} v' - a(y, t)v_y - i\frac{4}{\gamma^2}v_{yy} + |v|^\rho v = f \text{ em } Q, \\ v = 0 \text{ em } \Sigma, \\ v(y, t) = v_0(y) \text{ em } \Omega, \end{cases} \quad (i^2 = -1) \quad (2)$$

em que $a(y, t) = \frac{\gamma'(t)y + \alpha'(t) + \beta'(t)}{\gamma(t)}$ e $f(y, t) = \widehat{f}\left(\frac{\gamma(t)y + \alpha(t) + \beta(t)}{2}, t\right)$.

Para estudarmos o problema (2), precisamos das seguintes hipóteses:

(H1) $\alpha(t), \beta(t) \in W_{loc}^{2,\infty}([0, \infty))$;

(H2) $\exists \gamma_0 > 0$ tal que $\gamma(t) = \beta(t) - \alpha(t) \geq \gamma_0$, para todo $t \geq 0$;

(H3) $0 \leq \rho < \infty$.

Há uma extensa literatura disponível para o estudo da equação de Schrödinger definida em domínio cilíndrico, veja por exemplo a referência [1] e suas referências relacionadas. Em [4], Lions investiga a existência e unicidade de solução para a equação de Schrödinger com uma não linearidade do tipo $|u|^\rho u$, a mesma aqui considerada, porém o problema por ele estudado estava definido em um domínio cilíndrico. Em nosso estudo, consideramos a mesma mudança de variável empregada em [7], na qual os autores obtêm a Controlabilidade Exata para a equação de Schrödinger linear $u' - i\Delta u = 0$ em um domínio não-cilíndrico. A novidade deste trabalho é a utilização desses resultados no estudo de uma equação de Schrödinger não linear em domínio não-cilíndrico. Até onde sabemos, esta é a primeira vez que isso é realizado.

O objetivo deste trabalho é aplicar o método dos elementos finitos no espaço e o método das diferenças finitas no tempo, e, resolver o sistema não linear resultante pelo método de Newton. Além disso, simulações numéricas são apresentadas com dois tipos de fronteira móvel, mostrando a ordem de convergência do método empregado em uma tabela com seqüências de malhas e os gráficos da solução aproximada.

2 Existência e unicidade

Teorema 2.1. *Assumindo as hipóteses (H1) – (H3), consideramos o dado inicial $u_0 \in H_0^1(\Omega_0)$ e $\widehat{f} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega_t))$, então existe uma função $u : \widehat{Q} \rightarrow \mathbb{C}$ tal que*

1. $u \in L^\infty(0, T; H_0^1(\Omega_t)) \cap L^p(0, T; L^p(\Omega_t))$, com $p = \rho + 2$;
2. $u' \in L^{p'}(0, T; H^{-1}(\Omega_t))$, com $p' = \frac{\rho+2}{\rho+1}$;
3. $u' - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} u + |u|^\rho u = \hat{f}$ em $L^{\frac{\rho+2}{\rho+1}}(0, T; H^{-1}(\Omega_t))$;
4. $u(0) = u_0$ em Ω_0 .

Devido ao difeomorfismo \mathcal{T} , temos que u é uma solução do problema (1) pelo Teorema (2.1) se, e somente se, v é uma solução do problema (2) pelo seguinte teorema.

Teorema 2.2. *Assumindo as hipóteses (H1) – (H3), consideramos o dado inicial $v_0 \in H_0^1(\Omega)$ e $f \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, então existe uma função $v : Q \rightarrow \mathbb{C}$, tal que*

1. $v \in L^\infty(0, T; H_0^1(\Omega)) \cap L^p(0, T; L^p(\Omega))$, com $p = \rho + 2$;
2. $v' \in L^{p'}(0, T; H^{-1}(\Omega))$, com $p' = \frac{\rho+2}{\rho+1}$;
3. $v' - \frac{\gamma'y + \alpha' + \beta'}{\gamma} \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{4}{\gamma^2} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + |v|^\rho v = f$ em $L^{\frac{\rho+2}{\rho+1}}(0, T; H^{-1}(\Omega))$;
4. $v(0) = v_0$ em Ω .

O problema (2) é definido em um domínio cilíndrico, portanto, podemos usar o método de Galerkin e resultados de compacidade para provar o Teorema (2.2), ver [3].

3 Simulação Numérica

Vamos obter a solução numérica do problema em estudo para o caso unidimensional.

3.1 Método de Galerkin e sistema aproximado

Para cada m , seja $V_m = [w_1, w_2, \dots, w_m]$, em que $(w_j)_{j \in \mathbb{N}}$ é uma base Hilbertiana de $V = H_0^1(-1, 1)$. Assim, o problema aproximado consiste em determinar uma função $v_m : [0, T] \rightarrow V_m$, dada por $v_m(y, t) = \sum_{k=1}^m c_k(t) \varphi_k(y)$, com c_k sendo os coeficientes a determinar, satisfazendo

$$\left\{ \begin{array}{l} (v_m'(t), w) - \left(a(t) \frac{\partial v_m(t)}{\partial y}, w \right) + i \frac{4}{\gamma^2} \left(\frac{\partial v_m(t)}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ + (|v_m(t)|^\rho v_m(t), w) = (f(t), w) \text{ em } Q, \end{array} \right. \quad (3)$$

para todo $w \in V_m$, com $v_m = 0$ em Σ e $v_m(0) = v_{0m}$.

Substituindo a definição de v_m em (3) e tomando em particular $w = \varphi_j$, para todo $j = 1, \dots, m$, obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$Ac'(t) - B^T c(t) + i \frac{4}{\gamma^2} Dc(t) + R(c(t)) = F, \quad (4)$$

em que

$$A = [a_{kj}] = (\varphi_k, \varphi_j), \quad B = [b_{kj}] = \left(a(t) \frac{\partial \varphi_k}{\partial y}, \varphi_j \right), \quad D = [d_{kj}] = \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial y}, \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right),$$

$$R(c(t) = [r_{kj}(c(t))] = \left(\left| \sum_{i=1}^m c_i(t) \varphi_i \right|^\rho \sum_{k=1}^m c_k(t) \varphi_k, \varphi_j \right), \quad F = [f_{kj}] = (f, \varphi_j),$$

e $c(t) = [c_1(t), c_2(t), \dots, c_m(t)]^T$ é o vetor incógnita.

O sistema (4) é um sistema não linear de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Utilizamos o método dos elementos finitos tomando como base polinômios lineares por partes.

3.2 Método de diferenças finitas

Como a solução analítica do sistema não linear não é conhecida, vamos introduzir um método numérico utilizando diferenças finitas para obtermos uma solução discreta no tempo.

Seja $0 = t_1 < t_2 < \dots < t_N = T$ uma discretização uniforme do intervalo de tempo $[0, T], T > 0$. O método consiste em substituir as derivadas da EDO por aproximações construídas por diferenças finitas.

No sistema (4), tomando a média da equação nos tempos t_{n+1} e t_n e denotando $c^n = c(t_n)$, obtemos que

$$\begin{cases} \frac{1}{2}A((c')^{n+1} + (c')^n) - \frac{1}{2}((B^T)^{n+1}c^{n+1} + (B^T)^nc^n) \\ + \frac{1}{2}i\left(\frac{4}{(\gamma^2)^{n+1}}c^{n+1} + \frac{4}{(\gamma^2)^n}c^n\right)D + \frac{1}{2}(R(c^{n+1}) + R(c^n)) \\ = \frac{1}{2}(F^{n+1} + F^n). \end{cases} \quad (5)$$

Buscando diminuir o custo computacional, aproximações de segunda ordem foram consideradas para o termo envolvendo a derivada temporal, ver [3], resultando no seguinte sistema no tempo discreto $t = t_n$

$$M^{n+1}c^{n+1} + \Delta t R(c^{n+1}) + M^n = 0, \quad (6)$$

em que

$$M^{n+1} = 2A - \Delta t(B^T)^{n+1} + i \Delta t \frac{4}{(\gamma^2)^{n+1}}D,$$

$$M^n = \Delta t R(c^n) - \Delta t(F^{n+1} + F^n) - \left[2A + \Delta t(B^T)^n - i \Delta t \frac{4}{(\gamma^2)^n}D \right] c^n.$$

Como o sistema (6) é não linear, para cada n , vamos utilizar o método de Newton para encontrarmos a solução c^{n+1} .

3.3 Solução do sistema não linear

Encontrar a solução do sistema não linear (6), para cada passo de tempo n , é equivalente a encontrar a solução $X = c^{n+1}$ que satisfaça $G(X) = 0$, dado por $G(X) = M^{n+1}X + \Delta t R(X) + M^n$.

Utilizamos o método de Newton para encontrar a raiz da função G . Para cada n fixo, seja $X_1 = C^n$ a primeira aproximação para a solução de $G(X) = 0$. Pela solução do sistema linear $J(G(X_j)) \cdot s_j = -G(X_j)$, $j = 1, 2, \dots$ encontramos uma sequência de soluções aproximadas, em que $X_{j+1} = s_j + X_j$ e $J(G(X_j))$ é a matriz Jacobiana de G calculada em X_j . O critério de parada utilizado foi o $\|X_j - X_{j-1}\|_\infty < 10^{-12}$.

4 Simulação numérica

Nessa seção vamos apresentar alguns exemplos utilizados no estudo da influência da fronteira na equação de Schrödinger não linear. A implementação foi realizada no MatLab.

Verificamos a ordem de convergência, considerando discretizações idênticas para o espaço e tempo, denotadas por h_i . Para cada h_i , seja E_i o erro da solução aproximada na norma de $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$. Desta forma, para $h_{i+1} = h_i/2$, a taxa de convergência é dada por $p = \ln(\|E_i\|/\|E_{i+1}\|) / \ln(2)$, ver [6].

Em todas as simulações numéricas consideramos $\Omega = [-1, 1]$ e o tempo final $T = 2$. As fronteiras $\alpha(t)$ e $\beta(t)$ foram escolhidas de modo que a função $\gamma(t)$ tenha uma pequena variação em sua amplitude. Para isso, consideramos os seguintes tipos de fronteiras: **Fronteira 1:** $\alpha(t) = 0.01e^{(-t-1)} - 1$ e $\beta(t) = 1 - 0.01e^{(-t-1)}$ e **Fronteira 2:** $\alpha(t) = (\cos(2\pi t) - 3)/4$ e $\beta(t) = (16t + 1)/(16t + 2)$.

A figura (1) representa as funções $\beta(t)$ e $\alpha(t)$ das fronteiras 1 e 2, respectivamente.

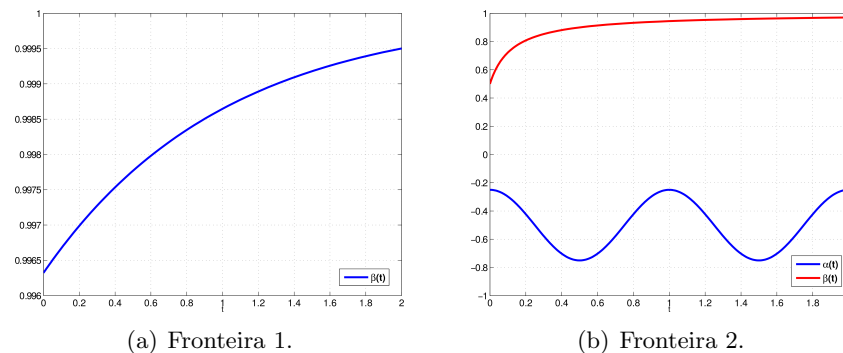


Figura 1: Funções $\beta(t)$ e $\alpha(t)$ das fronteiras 1 e 2.

Notemos que, na fronteira 1, a amplitude de $\gamma(t)$ varia no máximo 0.0073, e que, na fronteira 2, a amplitude de $\gamma(t)$ varia de 1.25 a 1.75. Além disso, a fronteira 2 foi escolhida para estudarmos o comportamento da solução com fronteiras não crescentes.

No exemplo a seguir, substituímos a solução v no sistema (2) para construir a função f e as condições iniciais, e apresentamos as taxas de convergências.

Exemplo: Consideramos como solução exata a função $v(y, t) = \text{sen}(\pi y)(\cos(\pi t) + 2) + i\text{sen}(\pi y)(\cos(\pi t) + 2)$.

A tabela 1 apresenta a taxa de convergência p da solução numérica v_m para $\rho = 0, \dots, 3$ com Fronteira 1. Os resultados numéricos mostram que a ordem de convergência do erro associado aos métodos aplicados é quadrática no tempo e no espaço.

h_i	p_{v_m}			
	$\rho = 0$	$\rho = 1$	$\rho = 2$	$\rho = 3$
2^{-5}	–	–	–	–
2^{-6}	1.9991	2.0183	2.0887	2.1930
2^{-7}	2.0007	2.0051	2.0002	2.3052
2^{-8}	1.9998	2.0006	2.0001	2.2291
2^{-9}	2.0000	2.0004	2.0000	2.0077
2^{-10}	2.0000	2.0001	2.0000	2.0024
2^{-11}	2.0000	1.9984	1.9995	2.0005

Tabela 1: **Fronteira 1:** Ordem de convergência.

A tabela 2 apresenta a taxa de convergência p da solução numérica v_m para $\rho = 0, \dots, 3$ com Fronteira 2. Como no caso anterior, os resultados numéricos também mostraram que a ordem de convergência do erro associado aos métodos aplicados é quadrática no tempo e no espaço.

h_i	p_{v_m}			
	$\rho = 0$	$\rho = 1$	$\rho = 2$	$\rho = 3$
2^{-5}	–	–	–	–
2^{-6}	2.1602	2.2081	2.1032	2.1941
2^{-7}	2.1468	1.9914	2.0003	2.3107
2^{-8}	2.0492	2.0014	1.9999	2.2190
2^{-9}	2.0205	2.0006	2.0000	2.0191
2^{-10}	2.0058	2.0001	2.0000	2.0043
2^{-11}	2.0006	2.0002	1.9999	2.0012

Tabela 2: **Fronteira 2:** Ordem de convergência.

A partir da análise de convergência do problema com fronteira fixa, retornamos ao problema original (1) realizando a mudança de variável de $y \in [-1, 1]$ para x , com $\alpha(t) \leq x \leq \beta(t)$, a partir do difeomorfismo.

A figura 2 representa a parte real da solução numérica com as fronteiras 1 e 2, respectivamente, para $\rho = 2$ e $h_i = 2^8$. Lembramos que a parte imaginária da solução é igual a parte real.

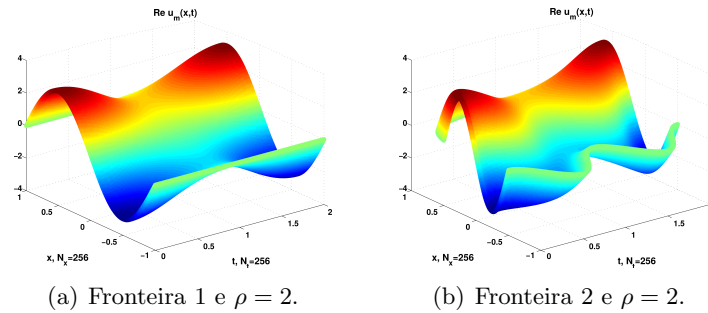


Figura 2: Solução numérica.

5 Conclusões

Neste trabalho, apresentamos resultados teóricos e numéricos de uma equação de Schrödinger não linear em domínio não-cilíndrico para o caso unidimensional. Destacamos o fato de não precisarmos adicionar hipóteses sobre as funções α e β para restringir o comportamento da fronteira. Essa restrição pode ser observada em trabalhos como [2] e [5], onde $\alpha' < 0$ e $\beta' > 0$. Os resultados numéricos foram satisfatórios, indicando que a ordem de convergência é quadrática no espaço e no tempo, como era esperado para a norma $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$.

Referências

- [1] T. Cazenave, Semilinear Schrodinger equations, Courant Lecture Notes in Mathematics, volume 10, New York, 2003.
- [2] H. R. Clark, M. A. Rincon e R. D. Rodrigues, Beam equation with weak-internal damping in domain with moving boundary, *Journal of Applied Numerical Mathematics*, volume 47, p. 139-157, 2003.
- [3] D. C. R. Gomes, Análise Teórica e Computacional de uma Equação de Schrödinger Não Linear com Fronteira Móvel, Dissertação de Mestrado, PPGI - UFRJ, 2015.
- [4] J. L. Lions, Quelques Méthodes de Résolutions des Problèmes aux Limites non Linéaires, Dunod Gauthier-Villars, Paris, 1969.
- [5] Liu, I-Shih e Rincon, M. A., Effect of moving boundaries on the vibrating elastic string, *Applied Numerical Mathematics*, volume 47, p. 159-172, 2003.
- [6] I-Shih Liu e M. A. Rincon, Introdução ao Método dos Elementos Finitos - Computação e Análise em Equações Diferenciais Parciais, Instituto de Matemática - UFRJ, Rio de Janeiro, 2013.
- [7] M. Milla Miranda e L. A. Medeiros, Controllabilité Exacte de l'équation de Schrödinger Dans de Domaines Non Cylindriques, *C.R.Acad. Sci. - Paris*, t.319, Serie 1, p. 685-689, 1994.