ΕΚ ΤΩΝ ΠΡΟΤΕΡΩΝ ΕΚΤΙΜΗΣΕΙΣ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΤΥΠΟΥ SCHRÖDINGER

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΕΙΡΗΝΗ ΚΥΖΑ
Επιβλέψας καθηγητής: ΧΑΡΑΛΑΜΠΟΣ ΜΑΚΡΙΔΑΚΗΣ

ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΟΥΣ»
ΤΜΗΜΑΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ & ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
του ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΚΡΗΤΗΣ

ΗΡΑΚΛΕΙΟ, ΝΟΕΜΒΡΙΟΣ 2008

Στους πρώτους μου δασκάλους,
τους γονείς μου.

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία εκπονήθηκε στα πλαίσια του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών «Μαθηματικά και Εφαρμογές τους» των Τμημάτων Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Κρήτης για την απόκτηση Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στα Θεωρητικά Μαθηματικά.

Η εργασία κατατέθηκε στο Τμήμα Μαθηματικών το Νοέμβριο του 2008. Την κριτική επιτροπή αποτέλεσαν οι ακαδημαϊκοί του Τμήματος Εφαρμοσμένων Μαθηματικών:

Θεόδωρος Κατσαούνης, Επίκουρος Καθηγητής

Γεώργιος Μακράκης, Αναπληρωτής Καθηγητής

Χαράλαμπος Μακριδάκης, Καθηγητής

Την επίβλεψή της ανέλαβε ο κ. Χ. Μακριδάκης.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα πρώτα να ευχαριστήσω το δάσκαλό μου, καθηγητή κ. Χ. Μακριδάκη που με τις συζητήσεις και την καθοδήγησή του με βοήθησε να καταλάβω τις κεντρικές ιδέες που πραγματεύεται η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία. Επίσης τον ευχαριστώ διότι μελέτησε την εργασία και έκανε διορθώσεις. Ευχαριστώ τους καθηγητές κ.κ. Θ. Κατσαούνη και Γ. Μακράκη που αποτέλεσαν μαζί με τον κ. Μακριδάκη την τριμελή μου επιτροπή. Και αυτοί μελέτησαν την εργασία και έκαναν διορθώσεις. Τέλος ευχαριστώ τον καθηγητή του Τμήματος Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων κ. Γ. Ακρίβη για τις συζητήσεις στην εργασία "G. Akrivis, V. Dougalis, O. Karakashian, *On fully discrete Galerkin methods of second-order temporal accuracy for the nonlinear Schrödinger equation*, Numer. Math. **59** (1991), 31-53 " από την οποία είναι κατά κύριο λόγο παρμένα τα αποτελέσματα του τρίτου κεφαλαίου.

Κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών για την απόκτηση Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης υποστηρίχθηκα οικονομικά από το Ινστιτούτο Υπολογιστικών Μαθηματικών του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας (υπότροφος στο ευρωπαϊκό ερευνητικό πρόγραμμα HYKE) και από τα Τμήματα Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Κρήτης (υποτροφία Μανασσάκη και υποτροφία Πηχωρίδη). Προς τα Ιδρύματα αυτά εκφράζω τις ευχαριστίες μου.

Περιεχόμενα

ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΟΙ

Έστω Ω ένα φραγμένο χωρίο του $\mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, με σύνορο $\partial\Omega$ (στην περίπτωση που το $d = 1$ το Ω είναι απλώς ένα διάστημα (a, b) με σύνορο τα άκρα του διαστήματος). Έστω επίσης z ένας μιγαδικός αριθμός. Τότε $|z|$ και $\bar{z}$ είναι το μέτρο και ο συζυγής του z αντίστοιχα.

Στην εργασία αυτή συμβολίζουμε με

$$L^2 := L^2(\Omega) = \{v : \Omega \to \mathbb{C} : \int_\Omega |v|^2 < \infty\}.$$

Έστω $(\cdot, \cdot)$ το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 το οποίο δίνεται από

$$(v, w) = \int_\Omega v(x)\bar{w}(x)\, dx,\ \ v, w \in L^2,$$

και $||\cdot||$ η αντίστοιχη νόρμα. Για $1 \leq p < \infty$, $p \neq 2$, συμβολίζουμε με $|\cdot|_p$ τη νόρμα του $L^p := L^p(\Omega)$, όπου

$$L^p(\Omega) = \{v : \Omega \to \mathbb{C} : \int_\Omega |v|^p < \infty\},$$

και για $p = \infty$, συμβολίζουμε με $||\cdot||_{L^\infty}$ τη νόρμα του $L^\infty := L^\infty(\Omega)$ με

$$L^\infty(\Omega) = \{v : \Omega \to \mathbb{C} : \operatorname{ess\,sup}_\Omega |v| < \infty\}.$$

Για κάθε $s \in \mathbb{N}_0$, έστω

$$\begin{aligned} H^s := H^s(\Omega) = \{v : \Omega \to \mathbb{C} :&\text{υπάρχουν όλες οι ασθενείς μερικές παράγωγοι} \\ &\text{τάξης μέχρι και } s \text{ και είναι στοιχεία του } L^2\}, \end{aligned}$$

οι μιγαδικοί χώροι Sobolev (οι οποίοι είναι χώροι Hilbert) και έστω $||\cdot||_s$ η αντίστοιχη νόρμα τους. Θυμίζουμε ότι $H^0 = L^2$. Έστω επίσης

$$H_0^1 := H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1 : v = 0 \text{ στο } \partial\Omega\},$$

δηλαδή ο H_0^1 είναι ο υπόχωρος του H^1 που περιέχει τα στοιχεία μηδενικού ίχνους.

Ορίζουμε ακόμα

$$(\nabla v, \nabla w) := \sum_{i=1}^{d} (v_{x_i}, w_{x_i}).$$

Τέλος, στην παρούσα εργασία, η C θα συμβολίζει μια θετική σταθερά, όχι α- παραίτητα ίδια σε διαφορετικές περιπτώσεις, η οποία θα είναι πάντοτε ανεξάρτητη από το χρονικό και το χωρικό βήμα, μπορεί όμως να εξαρτάται από τα δεδομένα του προ- βλήματος και την ακριβή λύση. Όπου χρειάζεται, θα αναφέρνουμε αναλυτικά από ποιες ποσότητες εξαρτάται η σταθερά C. Όταν θα γράφουμε $C(v)$ αντί της C θα εννοούμε βεβαίως ότι η σταθερά αυτή εξαρτάται από τη συνάρτηση v.

Εισαγωγή

Βασικός σκοπός της εργασίας αυτής είναι η μελέτη κατάλληλων αριθμητικών μεθόδων και η απόδειξη εκ των προτέρων εκτιμήσεων για τις εξισώσεις τύπου Schrödinger.

Η γενικότερη μορφή της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger δίνεται μέσω του προβλήματος

$$\begin{cases} u_t - \mathrm{i}\Delta u + \mathrm{i}g(x,t)u = f(x,t) & \text{στο } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \\ u(\cdot,0) = u_0 & \text{στο } \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{1}$$

όπου $g, f : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ και $u_0 : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ είναι δεδομένες συναρτήσεις. Στις πιο πολλές φυσικές εφαρμογές μελετάται το πιο απλό πρόβλημα στο οποίο η συνάρτηση g λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές και η συνάρτηση f είναι ταυτοτικά ίση με μηδέν. Η περίπτωση αυτή αποτελεί την πιο συνηθισμένη μορφή της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger και είναι βασικό μοντέλο σε διάφορα προβλήματα κβαντομηχανικής (βλέπε για παράδειγμα [1, Κεφ. 2.3-2.4] και [29]).

Η γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου, η οποία μπορεί να θεωρηθεί ως ειδική περίπτωση της συνηθισμένης μορφής της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger, περιγράφεται από το πρόβλημα

$$\begin{cases} u^\varepsilon_t - \mathrm{i}\dfrac{\varepsilon}{2}\Delta u^\varepsilon + \dfrac{\mathrm{i}}{\varepsilon}V(x)u^\varepsilon = 0 & \text{στο } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \\ u^\varepsilon(\cdot,0) = u^\varepsilon_0 & \text{στο } \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{2}$$

όπου $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ είναι δεδομένο ηλεκτροστατικό δυναμικό (και ως εκ τούτου λαμβάνει μόνο μη αρνητικές τιμές) και το ε είναι η σταθερά του Planck, δηλαδή μια θετική σταθερά πολύ μικρότερη της μονάδας ($0 < \varepsilon \ll 1$). Το πρόβλημα (2) παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον τόσο στο χώρο των Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων, όσο και στο χώρο της Αριθμητικής Ανάλυσης, εξαιτίας των ταλαντώσεων μικρού μήκους κύματος (τάξεως ε) στο χώρο και το χρόνο που παρουσιάζουν οι λύσεις των εξισώσεων αυτών. Ο κύριος λόγος της μελέτης του προβλήματος (2) είναι οι πολλές εφαρμογές που έχει στη Φυσική και την Τεχνολογία. Για παράδειγμα, το πρόβλημα (2) περιγράφει πολλά προβλήματα κβαντομηχανικής ([2]), οπτικής ([3]), θαλάσσιας ακουστικής και σεισμολογίας ([4]).

Τέλος η κυβική μη γραμμική εξίσωση Schrödinger, γνωστή ως κυβική NLS, περιγράφεται από το πρόβλημα

$$\begin{cases} u_t = \mathrm{i}\Delta u + \mathrm{i}\lambda|u|^2 u & \text{στο } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \\ u(\cdot, 0) = u_0 & \text{στο } \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{3}$$

όπου το λ είναι μια πραγματική παράμετρος και η $u_0 : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ είναι δεδομένη αρχική τιμή. Η κύρια δυσκολία του προβλήματος αυτού είναι ότι η λύση του μπορεί να εκρήγνυται σε πεπερασμένο χρόνο. Μας ενδιαφέρει όμως ποια είναι η συμπεριφορά της λύσης του προβλήματος (3), διότι όπως και η γραμμική περίπτωση, έτσι και η κυβική NLS έχει πολλές εφαρμογές. Συγκεκριμένα αποτελεί βασικό μοντέλο για μη γραμμικά κύματα σε διάφορους τομείς της Φυσικής, όπως η υδροδυναμική, η φυσική πλάσματος και η μη γραμμική οπτική ([5, σελ. 452-465], [6]).

Είναι λοιπόν εμφανές ότι οι εξισώσεις τύπου Schrödinger είναι εξισώσεις θεμελειώδους σημασίας για τη σύγχρονη Φυσική και την Τεχνολογία. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με τη δυσκολία της ακριβούς επίλυσης των προβλημάτων που αφορούν τις εξισώσεις Schrödinger οδήγησαν στην ανάγκη εύρεσης αριθμητικής προσέγγισης της ακριβούς λύσης, δηλαδή στην αριθμητική επίλυση των προβλημάτων αυτών. Είναι λοιπόν για τούτο το λόγο που πολλές εργασίες έχουν ως θέμα τους την επιλογή κατάλληλης αριθμητικής μεθόδου για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων τύπου Schrödinger και την απόδειξη εκ των προτέρων εκτιμήσεων. Αναφέρουμε ενδεικτικά τις εργασίες [7], [8], [9], [10] και [11] για τη γραμμική περίπτωση και [12], [13], [14], [15] και [16] για τη μη γραμμική περίπτωση. Οι μέθοδοι διακριτοποίησης που συνήθως επιλέγονται είναι πεπερασμένα στοιχεία ή πεπερασμένες διαφορές ή φασματικές μέθοδοι (για τη διακριτοποίηση ως προς το χώρο), σε συνδυασμό με τη μέθοδο Crank-Nicolson (για τη διακριτοποίηση ως προς το χρόνο) και φασματικές μέθοδοι σε συνδυασμό με τις μεθόδους splitting, καθώς επίσης και κάποιες παραλλαγές των μεθόδων αυτών. Τα αριθμητικά σχήματα επιλέγονται συνήθως έτσι, ώστε να ικανοποιούν «κατάλληλες» διακριτές αρχές διατήρησης. Τι εννοούμε με τον όρο «κατάλληλες» θα καταστεί σαφές στην ανάλυση των αριθμητικών μεθόδων στο κύριο μέρος της εργασίας.

Στο πρώτο κεφάλαιο της εργασίας αυτής θα θεωρήσουμε το πρόβλημα (1) σε ένα φραγμένο χωρίο με μηδενικές συνοριακές συνθήκες. Θα διακριτοποιήσουμε το πρόβλημα χρησιμοποιώντας πεπερασμένα στοιχεία και τη μέθοδο Crank-Nicolson και θα αποδείξουμε εκ των προτέρων εκτιμήσεις στην L^2- νόρμα.

Τα αποτελέσματα του δεύτερου κεφαλαίου θα είναι κυρίως παρμένα από το άρθρο [7] και θα αφορούν το πρόβλημα αρχικών-συνοριακών τιμών για τη μονοδιάστατη (ως προς το χώρο) γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Θα μελετηθούν τα σχήματα πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με τη μέθοδο Crank-Nicolson και φασματικών μεθόδων σε συνδυασμό με τις μεθόδους splitting. Θα γίνει σύγκριση των δύο μεθόδων και θα εξηγηθούν τα πλεονεκτήματα που έχουν οι splitting-φασματικές μέθοδοι σε σχέση με τα πεπερασμένα στοιχεία και τη μέθοδο Crank-Nicolson, όσον αφορά την επιλογή του χωρικού και χρονικού βήματος σε σχέση με το ε.

Στο τρίτο και τελευταίο κεφάλαιο θα μελετηθεί το πρόβλημα για την κυβική NLS σε ένα φραγμένο χωρίο με μηδενικές συνοριακές συνθήκες και θα γίνει η αριθμητική του επίλυση με χρήση πεπερασμένων στοιχείων και της μεθόδου Crank-Nicolson. Τα αποτελέσματα του κεφαλαίου αυτού θα είναι κατά κύριο λόγο παρμένα από το άρθρο [12].

Κεφάλαιο 1

Η γραμμική εξίσωση Schrödinger

1.1 Το πρόβλημα

Έστω $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, ένα φραγμένο χωρίο με σύνορο $\partial\Omega$ και έστω $0 < T < \infty$ δεδομένο. Θεωρούμε το παρακάτω πρόβλημα αρχικών-συνοριακών τιμών για τη γενικότερη μορφή της εξίσωσης Schrödinger: Ζητείται συνάρτηση $u : \bar{\Omega} \times [0, T] \to \mathbb{C}$ η οποία ικανοποιεί το πρόβλημα

$$
(1.1) \qquad \begin{cases} u_t - \mathrm{i}\Delta u + \mathrm{i}g(x,t)u = f(x,t) & \text{στο } \bar{\Omega} \times [0,T], \\ u = 0 & \text{στο } \partial\Omega \times [0,T], \\ u(\cdot, 0) = u_0 & \text{στο } \bar{\Omega}, \end{cases}
$$

όπου $g, f : \bar{\Omega} \times [0, T] \to \mathbb{C}$ και $u_0 : \bar{\Omega} \to \mathbb{C}$ είναι δεδομένες συναρτήσεις. Θα υποθέσουμε ότι οι συναρτήσεις αυτές είναι αρκετά ομαλές ώστε το πρόβλημα (1.1) να έχει μοναδική λύση, αρκούντως ομαλή για τις απαιτήσεις μας. Θέτουμε

$$
(1.2) \qquad M := \sup_{(x,t) \in \Omega \times [0,T]} |g(x,t)|.
$$

Στο παρόν κεφάλαιο, θα διακριτοποιήσουμε αρχικά το πρόβλημα (1.1) ως προς το χώρο, χρησιμοποιώντας πεπερασμένα στοιχεία. Για να το επιτύχουμε αυτό, για $0 < h < 1$, θεωρούμε το χώρο πεπερασμένων στοιχείων S_h, ο οποίος είναι ένας πεπερασμενοδιάστατος υπόχωρος του H_0^1 που αποτελείται από συνεχείς συναρτήσεις. Υποθέτουμε ότι ο χώρος αυτός ικανοποιεί την ακόλουθη προσεγγιστική ιδιότητα: Υπάρχει $r \geq 2$, $r \in \mathbb{N}$ έτσι ώστε

$$
(1.3) \qquad \inf_{\varphi \in S_h} (||v - \varphi|| + h||v - \varphi||_1) \leq Ch^s ||v||_s, \ 1 \leq s \leq r, \ \forall v \in H^s \cap H_0^1.
$$

Σχόλιο 1.1. Στην πράξη ο χώρος πεπερασμένων στοιχείων S_h αποτελείται από τμηματικά πολυωνυμικές συναρτήσεις, οι οποίες ορίζονται σε κατάλληλες διαμερίσεις του $\bar{\Omega}$ (π.χ. τριγωνοποιήσεις). Από εδώ και πέρα λοιπόν όταν αναφερόμαστε στον S_h θα εννοούμε ένα τέτοιο χώρο. Η βάση που συνήθως επιλέγουμε για τον S_h αποτελείται από στοιχεία με όσο το δυνατό μικρότερο φορέα.

Για $t \in [0,T]$, θα αναζητήσουμε προσέγγιση $u_h(t) \in S_h$ της ακριβούς λύσης u του προβλήματος (1.1). Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε το πλήρως διακριτό σχήμα με διακριτοποίηση ως προς το χρόνο τη μέθοδο Crank-Nicolson. Τόσο στο ημιδιακριτό, όσο και στο πλήρως διακριτό σχήμα, θα αποδειχθεί η καλή ορισιμότητα των προσεγγίσεων καθώς επίσης και βέλτιστης τάξης εκ των προτέρων εκτιμήσεις στην L^2- νόρμα.

Στην τελευταία ενότητα του κεφαλαίου αυτού, θα θεωρήσουμε την ειδική περίπτωση της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger, όπου $f \equiv 0$ και $g : \bar{\Omega} \times [0,T] \to \mathbb{R}$, δηλαδή η g λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές. Η περίπτωση αυτή, όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή, αποτελεί την πιο συνηθισμένη μορφή της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger με πολλές εφαρμογές στη Φυσική. Θυμίζουμε επίσης ότι και η γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου, την οποία θα μελετήσουμε αναλυτικά στο επόμενο κεφάλαιο, μπορεί να θεωρηθεί ειδική περίπτωση της συνηθισμένης μορφής της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger.

1.2 Ημιδιακριτοποίηση ως προς το χώρο με πεπερασμένα στοιχεία

Ορίζουμε ως ημιδιακριτή προσέγγιση της ακριβούς λύσης u του προβλήματος (1.1) την απεικόνιση $u_h : [0,T] \to S_h$ που ικανοποιεί το πρόβλημα

$$
\begin{cases} \big(u_{h,t}(t),\varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla u_h(t),\nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t)u_h(t),\varphi\big) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad = \big(f(t),\varphi\big), \quad \forall\varphi \in S_h,\ 0 \le t \le T, \\ u_h(\cdot,0) = u_h^0, \end{cases} \tag{1.4}
$$

όπου η $u_h^0 \in S_h$ είναι μια προσέγγιση της u_0. Θα υποθέσουμε ότι η u_h^0 είναι τέτοια ώστε

$$
||u_0 - u_h^0|| \le C||u_0||_r h^r. \tag{1.5}
$$

Για παράδειγμα η (1.5) ισχύει αν επιλέξουμε την u_h^0 να είναι η L^2- προβολή της u_0 στον S_h, δηλαδή αν ισχύει

$$(u_h^0, \varphi) = (u_0, \varphi), \ \forall \varphi \in S_h.$$

Πράγματι, στην περίπτωση αυτή θα έχουμε ότι

$$(u_0 - u_h^0, \varphi) = 0, \ \forall \varphi \in S_h.$$

Συνεπώς

$$(u_0 - u_h^0, u_0 - u_h^0 - u_0 + \varphi) = 0, \ \forall \varphi \in S_h,$$

δηλαδή

$$||u_0 - u_h^0|| \leq ||u_0 - \varphi||, \ \forall \varphi \in S_h.$$

Χρησιμοποιώντας εδώ την (1.3) για $s = r$ λαμβάνουμε την (1.5).

Παρατήρηση 1.1. Παρατηρούμε ότι το πρόβλημα (1.1) γράφεται ισοδύναμα σε μεταβολική μορφή ως

$$\begin{cases} (u_t(t), v) + \mathrm{i}(\nabla u(t), \nabla v) + \mathrm{i}(g(t)u(t), v) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad = (f(t), v), \quad \forall v \in H_0^1, \ 0 \leq t \leq T, \\ u(\cdot, 0) = u_0. \end{cases} \tag{1.6}$$

Επομένως το πρόβλημα (1.4) είναι το ανάλογο του (1.6) διατυπωμένο στον πεπερασμενοδιάστατο υπόχωρο S_h.

Πρόταση 1.1. (Ύπαρξη και μοναδικότητα.) *Υπάρχει μοναδική λύση* $u_h : [0, T] \to S_h$ *του προβλήματος* (1.4).

Απόδειξη. Έστω $\dim S_h = N_h \in \mathbb{N}$ και $\{\varphi_1, \cdots, \varphi_{N_h}\}$ μια βάση του S_h. Αφού για κάθε $t \in [0, T]$, $u_h(t) \in S_h$, η u_h γράφεται ως

$$u_h(t) = \sum_{j=1}^{N_h} \alpha_j(t)\varphi_j, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Έστω $u_h^0 = \sum_{j=1}^{N_h} \gamma_j \varphi_j$. Τότε το πρόβλημα (1.4) είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα

$$\begin{cases} \mathbf{A}\alpha'(t) + \mathrm{i}\mathbf{B}(t)\alpha(t) = \mathbf{F}(t), \ t \in [0, T], \\ \alpha(0) = [\gamma_1, \cdots, \gamma_{N_h}]^{\mathrm{T}}, \end{cases} \tag{1.7}$$

όπου

$$\mathbf{A} = [(\varphi_j, \varphi_i)]_{i,j=1,\cdots,N_h},$$

και για $t \in [0, T]$,

$$\mathbf{B}(t) = [(\nabla\varphi_j, \nabla\varphi_i) + (g(t)\varphi_j, \varphi_i)]_{i,j=1,\cdots,N_h},$$

$$\mathbf{F}(t) = [(f(t), \varphi_1), \cdots, (f(t), \varphi_{N_h})]^{\mathrm{T}}$$

και

$$\alpha(t) = [\alpha_1(t), \cdots, \alpha_{N_h}(t)]^{\mathrm{T}},$$

το άγνωστο διάνυσμα.

Το (1.7) είναι ένα πρόβλημα αρχικών τιμών για ένα $N_h \times N_h$ γραμμικό σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Εφόσον η συνάρτηση g είναι ομαλή ως προς το χρόνο, τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{B}$ είναι ομαλά. Επίσης ο πίνακας μάζας $\mathbf{A}$ είναι αντιστρέψιμος ως πίνακας Gram (εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι είναι ερμιτιανός και θετικά ορισμένος). Επομένως από τη θεωρία των γραμμικών συνήθων διαφορικών εξισώσεων συμπεραίνουμε ότι υπάρχει μοναδική λύση του προβλήματος (1.7) και άρα του προβλήματος (1.4). □

Πρόταση 1.2. (Ευστάθεια του ημιδιακριτού προβλήματος στην L^2-νόρμα.) *Έστω $\upsilon_h : [0, T] \to S_h$ η λύση του προβλήματος*

$$\begin{cases} (\upsilon_{h,t}(t), \varphi) + \mathrm{i}(\nabla\upsilon_h(t), \nabla\varphi) + \mathrm{i}(g(t)\upsilon_h(t), \varphi) = 0, \ \forall\varphi \in S_h, \ 0 \le t \le T, \\ \upsilon(\cdot, 0) = \upsilon_h^0. \end{cases} \tag{1.8}$$

Τότε

$$\max_{0\le t\le T} ||\upsilon_h(t)|| \le \mathrm{e}^{MT} ||\upsilon_h^0||, \tag{1.9}$$

όπου M η σταθερά που εμφανίζεται στην (1.2).

Απόδειξη. Θέτοντας $\varphi = \upsilon_h$ στην πρώτη εξίσωση του προβλήματος (1.8) και λαμβάνοντας στη συνέχεια πραγματικά μέρη έχουμε

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}||\upsilon_h(t)||^2 = \mathrm{Im}(g(t)\upsilon_h, \upsilon_h), \ 0 \le t \le T.$$

Επομένως,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}||\upsilon_h(t)||^2 \le M||\upsilon_h(t)||^2,$$

ή

$$||\upsilon_h(t)|| \frac{d}{dt} ||\upsilon_h(t)|| \leq M ||\upsilon_h(t)||^2.$$

Άρα

$$\frac{d}{dt} ||\upsilon_h(t)|| \leq M ||\upsilon_h(t)||, \ 0 \leq t \leq T.$$

(Η περίπτωση που $\upsilon_h(t) = 0$ για κάποιο t διευθετείται εύκολα.) Συνεπώς,

$$||\upsilon_h(t)|| \leq \mathrm{e}^{Mt} ||\upsilon_h^0||, \ 0 \leq t \leq T,$$

από την οποία έπεται αμέσως η (1.9). □

Ορισμός 1.1. *Η ελλειπτική προβολή (ή προβολή Ritz)* $R_h : H_0^1 \to S_h$ *ορίζεται ως*

$$\big(\nabla(R_h \upsilon), \nabla\varphi\big) = \big(\nabla\upsilon, \nabla\varphi\big), \ \forall \varphi \in S_h. \tag{1.10}$$

Είναι γνωστό από την ελλειπτική θεωρία (βλέπε π.χ. [17, σελ. 64-65] και [30, σελ. 177]) ότι η ελλειπτική προβολή $R_h \upsilon$ του στοιχείου $\upsilon \in H_0^1$ ορίζεται μονοσήμαντα και ικανοποιεί (λόγω της (1.3)) την

$$||\upsilon - R_h \upsilon|| + h ||\upsilon - R_h \upsilon||_1 \leq C h^r ||\upsilon||_r, \ \forall \upsilon \in H^r \cap H_0^1. \tag{1.11}$$

Σχόλιο 1.2. *(Χρησιμότητα της ελλειπτικής προβολής.)* Συνδυάζοντας τις (1.4) και (1.6) λαμβάνουμε ότι

$$\begin{aligned} \big((u - u_h)_t(t), \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla(u - u_h)(t), \varphi\big) \\ + \mathrm{i}\big(g(t)(u - u_h)(t), \varphi\big) = 0, \ \forall \varphi \in S_h, \ t \in [0, T]. \end{aligned} \tag{1.12}$$

Συνεπώς για να εκτιμήσουμε το σφάλμα $u - u_h$ θα θέλαμε να θέσουμε στην (1.12) $\varphi = u - u_h$. Όμως αυτό δεν μπορούμε να το κάνουμε, διότι η ακριβής λύση u δεν είναι εν γένει στοιχείο του S_h. Έτσι αντί να συγκρίνουμε απευθείας τη u_h με την ακριβή λύση, τη συγκρίνουμε με την ελλειπτική προβολή $R_h u$, της οποίας αφ' ενός η απόσταση από τη u είναι τάξης $O(h^r)$ στην L^2-νόρμα (δηλαδή είναι βέλτιστης τάξης) και αφ' ετέρου ικανοποιεί, λόγω της (1.10), μια εξίσωση αντίστοιχη της (1.6).

Θεώρημα 1.1. (Εκ των προτέρων εκτίμηση στην L^2-νόρμα.) *Έστω* u_h *η μοναδική λύση του ημιδιακριτού προβλήματος* (1.4) *και έστω ότι η* $u_h^0 \in S_h$ *ικανοποιεί την* (1.5). *Τότε αν η λύση του προβλήματος* (1.1) *είναι αρκετά ομαλή, ισχύει η εκ των προτέρων εκτίμηση σφάλματος*

$$\max_{0 \leq t \leq T} ||u(t) - u_h(t)|| \leq C(u) h^r, \tag{1.13}$$

όπου η σταθερά $C(u)$ εξαρτάται από τη λύση u και τα δεδομένα του προβλήματος, όχι όμως από το h.

Απόδειξη. Γράφουμε το σφάλμα (βλέπε π. χ. [18, σελ. 9] και [30, σελ. 179] για παραβολικά προβλήματα και [12] για τη μη γραμμική εξίσωση Schrödinger) ως

$$u - u_h = \rho + \theta, \text{ όπου } \rho := u - R_h u \text{ και } \theta := R_h u - u_h. \tag{1.14}$$

Από την (1.11) έχουμε ότι

$$||\rho(t)|| = ||u(t) - R_h u(t)|| \leq C||u(t)||_r h^r, \ 0 \leq t \leq T,$$

και άρα

$$\max_{0\leq t\leq T} ||\rho(t)|| \leq C \max_{0\leq t\leq T} ||u(t)||_r h^r.$$

Επομένως απομένει να εκτιμήσουμε τον όρο $\max_{0\leq t\leq T} ||\theta(t)||$.

Συνδυάζοντας τις (1.4), (1.6) και (1.10) λαμβάνουμε, για κάθε $\varphi \in S_h$ και $t \in [0, T]$, ότι

$$\big(\theta_t(t), \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla\theta(t), \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t)\theta(t), \varphi\big) = -\big(\rho_t(t), \varphi\big) - \mathrm{i}\big(g(t)\rho(t), \varphi\big). \tag{1.15}$$

Θέτοντας $\varphi = \theta$ στη (1.15) και λαμβάνοντας κατόπιν πραγματικά μέρη παίρνουμε

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}||\theta(t)||^2 - \mathrm{Im}\big(g(t)\theta(t), \theta(t)\big) = -\mathrm{Re}\big(\rho_t(t), \theta(t)\big) + \mathrm{Im}\big(g(t)\rho(t), \theta(t)\big),$$

και άρα χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}||\theta(t)||^2 \leq (||\rho_t(t)|| + M||\rho(t)|| + M||\theta(t)||)\, ||\theta(t)||, \ 0 \leq t \leq T.$$

Συνεπώς,

$$\frac{d}{dt}||\theta(t)|| \leq M||\theta(t)|| + (||\rho_t(t)|| + M||\rho(t)||), \ 0 \leq t \leq T. \tag{1.16}$$

Χρησιμοποιώντας στη συνέχεια την ανισότητα Gronwall συμπεραίνουμε ότι

$$\max_{0\leq t\leq T} ||\theta(t)|| \leq \mathrm{e}^{MT}\big[||\theta(0)|| + \int_0^T (||\rho_t(\tau)|| + M||\rho(\tau)||)\, d\tau\big]. \tag{1.17}$$

Όμως,

$$||\theta(0)|| = ||R_h u(0) - u_h^0|| \leq ||R_h u(0) - u_0|| + ||u_0 - u_h^0||.$$

Επομένως από την (1.11) έπεται ότι

$$||\theta(0)|| \le ||u_0 - u_h^0|| + C||u_0||_r h^r. \tag{1.18}$$

Από τη μοναδικότητα της ελλειπτικής προβολής έπεται επίσης ότι $R_h u_t = (R_h u)_t$. Άρα, όπως πριν, λαμβάνουμε από την (1.11) ότι

$$\max_{0\le t\le T} ||\rho_t(t)|| \le C \max_{0\le t\le T} ||u_t(t)||_r h^r. \tag{1.19}$$

Συνδυάζοντας τις (1.16)-(1.19) καταλήγουμε στην

$$\max_{0\le t\le T} ||u(t) - u_h(t)|| \le \mathrm{e}^{MT}||u_0 - u_h^0|| + C(u)h^r. \tag{1.20}$$

Χρήση της (1.5) στην (1.20) δίνει τώρα την (1.13). □

1.3 Το πλήρως διακριτό σχήμα με διακριτοποίηση ως προς το χρόνο τη μέθοδο Crank-Nicolson

Στην ενότητα αυτή θα θεωρήσουμε το πλήρως διακριτό σχήμα για το πρόβλημα (1.1) με διακριτοποίηση ως προς το χρόνο τη μέθοδο Crank-Nicolson, ενώ η διακριτοποίηση ως προς το χώρο θα γίνει όπως και στην προηγούμενη ενότητα με πεπερασμένα στοιχεία.

Έστω λοιπόν $N \in \mathbb{N}$, $k := \frac{T}{N}$ το χρονικό βήμα και $t^n = nk$, $n = 0, 1 \dots, N$, οι κόμβοι. Για δεδομένα $\upsilon^0, \dots, \upsilon^N$, θα χρησιμοποιήσουμε τους συμβολισμούς

$$\partial \upsilon^n := \frac{1}{k}(\upsilon^{n+1} - \upsilon^n), \tag{1.21}$$

και

$$\upsilon^{n+\frac{1}{2}} := \frac{1}{2}(\upsilon^{n+1} + \upsilon^n). \tag{1.22}$$

Διακριτοποιούμε το ημιδιακριτό πρόβλημα (1.4) ως προς το χρόνο με τη μέθοδο Crank-Nicolson και οδηγούμαστε σε προσεγγίσεις $U^n \in S_h$ των $u^n := u(., t^n)$ οι οποίες ικανοποιούν το παρακάτω αναδρομικό σχήμα

$$\begin{cases} \big(\partial U^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla U^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}})U^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) \\ \qquad\qquad = \big(f(t^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big), \quad \forall \varphi \in S_h,\ n = 0, 1 \dots, N-1, \\ U^0 := u_h^0, \end{cases} \tag{1.23}$$

Θα αποδείξουμε ότι, υπό κάποιο περιορισμό στο χρονικό βήμα, οι προσεγγίσεις U^n, $n = 0, 1, \ldots, N$, είναι καλά ορισμένες και ότι το πλήρως διακριτό σχήμα είναι ευσταθές ως προς την L^2-νόρμα. Τέλος θα αποδείξουμε, την ανάλογη με την (1.13), εκ των προτέρων εκτίμηση.

Στα όσα θα ακολουθήσουν στην παρούσα ενότητα, θα υποθέτουμε ότι το χρονικό βήμα k έχει επιλεγεί ώστε να ικανοποιείται η

$$k < \frac{2}{M}. \tag{1.24}$$

Πρόταση 1.3. (Ύπαρξη και μοναδικότητα των U^n.) *Υπό την προϋπόθεση* (1.24) *υπάρχουν μοναδικά* U^n, $n = 0, 1, \ldots, N$, *που ικανοποιούν το πλήρως διακριτό σχήμα* (1.23).

Απόδειξη. Για $n = 0$, το $U^0 = u_h^0$ είναι προφανώς καλά ορισμένο. Υποθέτουμε ότι για δεδομένο n, το U^n ορίζεται κατά μοναδικό τρόπο. Τότε για τον υπολογισμό του U^{n+1} χρειάζεται να επιλύσουμε ένα γραμμικό τετραγωνικό σύστημα. Επομένως για να αποδείξουμε ότι το U^{n+1} ορίζεται καλώς, αρκεί να δείξουμε ότι το αντίστοιχο του (1.23) ομογενές σύστημα, έχει μοναδική λύση. (Θυμίζουμε ότι στα τετραγωνικά συστήματα η μοναδικότητα συνεπάγεται και ύπαρξη της λύσης.) Το αντίστοιχο του (1.23) ομογενές σύστημα λαμβάνεται αν θέσουμε στην πρώτη εξίσωση του (1.23) $U^n = 0$ και $f \equiv 0$. Στην περίπτωση αυτή ικανοποιείται η

$$\frac{1}{k}\big(U^{n+1}, \varphi\big) + \frac{\mathrm{i}}{2}\big(\nabla U^{n+1}, \nabla\varphi\big) + \frac{\mathrm{i}}{2}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}})U^{n+1}, \varphi\big) = 0, \ \forall\varphi \in S_h.$$

Λαμβάνοντας εδώ $\varphi = U^{n+1}$ και στη συνέχεια πραγματικά μέρη παίρνουμε ότι

$$\frac{1}{k}||U^{n+1}||^2 \le \frac{M}{2}||U^{n+1}||^2.$$

Χρήση της (1.24) δίνει ότι $U^{n+1} = 0$, επομένως το αντίστοιχο ομογενές σύστημα έχει μόνο την τετριμμένη μηδενική λύση και άρα το σύστημα (1.23) έχει μοναδική λύση. □

Πρόταση 1.4. (Ευστάθεια του πλήρως διακριτού σχήματος στην L^2-νόρμα.) *Υπό την προϋπόθεση* (1.24) *ισχύει για το πρόβλημα*

$$\begin{cases} \big(\partial V^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla V^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}})V^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) = 0, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \forall\varphi \in S_h, \ n = 0, 1 \ldots, N-1, \\ V^0 \in S_h \ \textit{δεδομένο}, \end{cases} \tag{1.25}$$

ότι

$$||V^{n+1}|| \le \sqrt{\frac{1+\frac{Mk}{2}}{1-\frac{Mk}{2}}}||V^n||, \ n = 0, 1, \dots, N-1. \tag{1.26}$$

Επομένως υπάρχει σταθερά C ανεξάρτητη του k τέτοια ώστε

$$\max_{0\le n\le N} ||V^n|| \le C||V^0||. \tag{1.27}$$

Απόδειξη. Λαμβάνοντας $\varphi = V^{n+\frac{1}{2}}$ και κατόπιν πραγματικά μέρη στην πρώτη εξίσωση της (1.25) παίρνουμε ότι

$$\frac{1}{k}(||V^{n+1}||^2 - ||V^n||^2) \le M(||V^{n+1}|| + ||V^n||)^2,$$

ή

$$\frac{1}{k}(||V^{n+1}|| + ||V^n||)(||V^{n+1}|| - ||V^n||) \le M(||V^{n+1}|| + ||V^n||)^2.$$

Επομένως, χρησιμοποιώντας εδώ την (1.24),

$$||V^{n+1}|| \le \sqrt{\frac{1+\frac{Mk}{2}}{1-\frac{Mk}{2}}}||V^n||, \ n = 0, 1, \dots, N-1,$$

που είναι η (1.26). Από την άλλη μεριά,

$$\frac{1+\frac{Mk}{2}}{1-\frac{Mk}{2}} = 1 + Mk + O(k^2).$$

Συνεπώς,

$$\frac{1+\frac{Mk}{2}}{1-\frac{Mk}{2}} \le \mathrm{e}^{Mk+O(k^2)}.$$

Η (1.26) δίνει ότι

$$||V^{n+1}||^2 \le \frac{1+\frac{Mk}{2}}{1-\frac{Mk}{2}}||V^n||^2, \ n = 0, 1, \dots, N-1,$$

και επομένως επαγωγικά,

$$\max_{0\le n\le N} ||V^n||^2 \le \mathrm{e}^{MNk+NO(k^2)}||V^0||^2. \tag{1.28}$$

Εφόσον $Nk = T$, από την (1.28) λαμβάνουμε την (1.27). □

Λήμμα 1.1. (Σφάλμα συνέπειας.) *Για* $n = 0, 1, \ldots, N-1$, *η ελλειπτική προβολή* $R_h u^n$ *της* $u^n := u(\cdot, t^n)$ *ικανοποιεί την εξίσωση*

$$\begin{aligned} &\big(\partial R_h u^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}}) R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) \\ &\qquad = \big(f(t^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big) + \big(E^n, \varphi\big),\ \forall \varphi \in S_h,\ n = 0, 1, \ldots, N-1, \end{aligned} \tag{1.29}$$

με

$$\max_{0 \le n \le N-1} ||E^n|| \le C(u)(h^r + k^2), \tag{1.30}$$

και όπου η σταθερά $C(u)$ *εξαρτάται από τη λύση* u *και τα δεδομένα του προβλήματος, όχι όμως από τα* h *και* k.

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας την (1.10), έχουμε για $\varphi \in S_h$ και $n = 0, 1, \ldots, N-1$,

$$\begin{aligned} &\big(\partial R_h u^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}}) R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) - \big(f(t^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big) \\ &= \big(\partial R_h u^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla u^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}}) R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) - \big(f(t^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big). \end{aligned}$$

Συνεπώς από την (1.6),

$$\begin{aligned} &\big(\partial R_h u^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}}) R_h u^{n+\frac{1}{2}}, \varphi\big) - \big(f(t^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big) \\ &\qquad = \big(E^n, \varphi\big),\ \forall \varphi \in S_h,\ n = 0, 1, \ldots, N-1, \end{aligned} \tag{1.31}$$

όπου για $n = 0, 1, \ldots, N-1$,

$$E^n := E_1^n + E_2^n + E_3^n + E_4^n + E_5^n,$$

με

$$E_1^n = \partial R_h u^n - \partial u^n, \tag{1.32}$$

$$E_2^n = \partial u^n - u_t(t^{n+\frac{1}{2}}), \tag{1.33}$$

$$E_3^n = \mathrm{i}\big(\Delta u(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}}) - \Delta u^{n+\frac{1}{2}}\big), \tag{1.34}$$

$$E_4^n = -\mathrm{i} g(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}})(u^{n+\frac{1}{2}} - R_h u^{n+\frac{1}{2}}), \tag{1.35}$$

$$E_5^n = -\mathrm{i} g(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}})\big(u(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}}) - u^{n+\frac{1}{2}}\big). \tag{1.36}$$

Επομένως αρκεί να εκτιμήσουμε τις ποσότητες $\max_{0\le n\le N-1}||E_i^n||$, $i=1,\dots,5$.

Αρχικά παρατηρούμε ότι $((R_h)_t u = R_h u_t)$

$$E_1^n = \frac{1}{k}\int_{t^n}^{t^{n+1}} \big[R_h u_t(\cdot,t) - u_t(\cdot,t)\big]\,dt.$$

Συνεπώς χρησιμοποιώντας την (1.11),

$$||E_1^n|| \le C \max_{t^n\le t\le t^{n+1}} ||u_t(t)||_r h^r,\ n=0,1,\dots,N-1,$$

από την οποία συμπεραίνουμε ότι

$$\max_{0\le n\le N-1} ||E_1^n|| \le C \max_{0\le t\le T} ||u_t(t)||_r h^r. \tag{1.37}$$

Επίσης αναπτύσσοντας κατά Taylor ως προς το σημείο $t^{n+\frac12}$ ([31, σελ. 235], Θεώρημα Taylor) έχουμε

$$E_2^n = \frac{1}{2k}\Big[\int_{t^n}^{t^{n+\frac12}} (t-t^n)^2 u_{ttt}(\cdot,t)\,dt + \int_{t^{n+\frac12}}^{t^{n+1}} (t-t^{n+\frac12})^2 u_{ttt}(\cdot,t)\,dt\Big],$$

και άρα

$$||E_2^n|| \le C \max_{t^n\le t\le t^{n+1}} ||u_{ttt}(t)|| k^2,\ n=0,1,\dots,N-1.$$

Δηλαδή,

$$\max_{0\le n\le N-1} ||E_2^n|| \le C \max_{0\le t\le T} ||u_{ttt}(t)|| k^2. \tag{1.38}$$

Ομοίως χρησιμοποιώντας και πάλι το Θεώρημα Taylor, παίρνουμε ότι

$$u(\cdot,t^{n+\frac12}) - u^{n+\frac12} = \frac12\Big[\int_{t^{n+\frac12}}^{t^{n+1}} (t-t^{n+1}) u_{tt}(\cdot,t)\,dt - \int_{t^n}^{t^{n+\frac12}} (t-t^n) u_{tt}(\cdot,t)\,dt\Big]. \tag{1.39}$$

Ακριβώς αντίστοιχη σχέση με την (1.39) λαμβάνουμε και για τη διαφορά $\Delta u(\cdot,t^{n+\frac12}) - \Delta u^{n-\frac12}$. Επομένως,

$$||E_3^n|| \le C \max_{t^n\le t\le t^{n+1}} ||\Delta u_{tt}(t)|| k^2,\ n=0,1,\dots,N-1,$$

ή

$$\max_{0\le n\le N-1} ||E_3^n|| \le C \max_{0\le t\le T} ||\Delta u_{tt}(t)|| k^2, \tag{1.40}$$

και αναλόγως

$$\max_{0\le n\le N-1} ||E_5^n|| \le CM \max_{0\le t\le T} ||u_{tt}(t)||k^2. \tag{1.41}$$

Τέλος, σύμφωνα με την (1.11),

$$\max_{0\le n\le N-1} ||E_4^n|| \le CM \max_{0\le t\le T} ||u(t)||_r h^r. \tag{1.42}$$

Από τις (1.37)-(1.42) συμπεραίνουμε την εκτίμηση (1.30). □

Παρατήρηση 1.2. Η σταθερά C που εμφανίζεται στις (1.37)-(1.42) είναι ανεξάρτητη από την ακριβή λύση u και τη συνάρτηση g (και φυσικά από τα h και k). Η παρατήρηση αυτή θα μας φανεί χρήσιμη όταν θα εφαρμόσουμε το συγκεκριμένο αριθμητικό σχήμα στο πρόβλημα που αφορά τη γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου.

Θεώρημα 1.2. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για το πλήρως διακριτό σχήμα.) *Για $n = 0, 1, \dots, N$, έστω $u^n := u(\cdot, t^n)$ και U^n οι προσεγγίσεις που ορίζονται από το αριθμητικό σχήμα (1.23). Υποθέτουμε ότι η λύση u του προβλήματος (1.1) είναι αρκετά ομαλή και ότι η $u_h^0 \in S_h$ ικανοποιεί την (1.5). Τότε υπό την προϋπόθεση (1.24) ισχύει η εκ των προτέρων εκτίμηση*

$$\max_{0\le n\le N} ||u^n - U^n|| \le C(u)(h^r + k^2), \tag{1.43}$$

όπου η σταθερά $C(u)$ εξαρτάται από τη u και τα δεδομένα του προβλήματος, όχι όμως από τα h και k.

Απόδειξη. Κατ' αναλογία προς την (1.14) γράφουμε για $n = 0, 1, \dots, N$,

$$u^n - U^n = \rho^n + \theta^n \text{ με } \rho^n := u^n - R_h u^n \text{ και } \theta^n := R_h u^n - U^n.$$

Σύμφωνα με την (1.11) έχουμε ότι

$$\max_{0\le n\le N} ||\rho^n|| \le C \max_{0\le n\le N} ||u(t^n)||_r h^r. \tag{1.44}$$

Επομένως απομένει να εκτιμήσουμε την ποσότητα $\max_{0\le n\le N} ||\theta^n||$. Αφαιρώντας την πρώτη εξίσωση της (1.23) από την (1.31) λαμβάνουμε ότι

$$\begin{aligned}\big(\partial\theta^n, \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla\theta^{n+\frac12}, \nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac12})\theta^{n+\frac12}, \varphi\big)\\ = -\big(E^n, \varphi\big),\ \forall\varphi \in S_h,\ n = 0, 1, \dots, N-1.\end{aligned} \tag{1.45}$$

Θυμίζουμε ότι τα E^n, $n = 0, 1, \ldots, N-1$, ικανοποιούν την (1.29). Λαμβάνοντας στην (1.45) $\varphi = \theta^{n+\frac{1}{2}}$ και στη συνέχεια πραγματικά μέρη και χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz παίρνουμε ότι

$$\frac{1}{k}(||\theta^{n+1}||^2 - ||\theta^n||^2) \leq \frac{M}{2}(||\theta^{n+1}|| + ||\theta^n||)^2 + ||E^n||(||\theta^{n+1}|| + ||\theta^n||),$$

ή

$$||\theta^{n+1}|| - ||\theta^n|| \leq \frac{Mk}{2}(||\theta^{n+1}|| + ||\theta^n||) + k||E^n||, \ n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{1.46}$$

Άρα χρησιμοποιώντας την (1.24) καταλήγουμε στη σχέση

$$||\theta^{n+1}|| \leq \frac{1 + \frac{Mk}{2}}{1 - \frac{Mk}{2}}||\theta^n|| + \frac{k}{1 - \frac{Mk}{2}}||E^n||, \ n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{1.47}$$

Οπότε, χρησιμοποιώντας επαγωγή και εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη της Πρότασης 1.4 μπορούμε να αποδείξουμε ότι

$$\max_{0 \leq n \leq N} ||\theta^n|| \leq \mathrm{e}^{MT+O(k)}(||\theta^0|| + \frac{1}{M} \max_{0 \leq n \leq N-1} ||E^n||).$$

Χρήση της (1.30) δίνει τώρα ότι

$$\max_{0 \leq n \leq N} ||\theta^n|| \leq \mathrm{e}^{MT+O(k)}\big(||\theta^0|| + C(u)(h^r + k^2)\big). \tag{1.48}$$

Τέλος, εφόσον $||\theta^0|| \leq ||\rho^0|| + ||u_0 - u_h^0||$, ο συνδυασμός των (1.5), (1.44) και (1.48) οδηγεί στη ζητούμενη εκτίμηση (1.43). □

1.4 Μια ενδιαφέρουσα ειδική περίπτωση

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε την πιο συνηθισμένη μορφή της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger, δηλαδή την περίπτωση που η συνάρτηση f είναι ταυτοτικά ίση με μηδέν και η συνάρτηση g λαμβάνει **μόνο** πραγματικές τιμές. Με άλλα λόγια θα μελετήσουμε το πρόβλημα

$$\begin{cases} u_t - \mathrm{i}\Delta u + \mathrm{i}g(x,t)u = 0 & \text{στο } \bar{\Omega} \times [0,T], \\ u = 0 & \text{στο } \partial\Omega \times [0,T], \\ u(\cdot, 0) = u_0 & \text{στο } \bar{\Omega}, \end{cases} \tag{1.49}$$

με $g : \bar{\Omega} \times [0, T] \to \mathbb{R}$ και $u_0 : \bar{\Omega} \to \mathbb{C}$ δεδομένες συναρτήσεις. Το πρόβλημα (1.49) γράφεται ισοδύναμα σε μεταβολική μορφή ως

$$
\begin{cases} (u_t(t), v) + \mathrm{i}(\nabla u(t), \nabla v) + \mathrm{i}(g(t)u(t), v) = 0, \quad \forall v \in H_0^1,\ 0 \le t \le T, \\ u(\cdot, 0) = u_0. \end{cases} \tag{1.50}
$$

Θέτοντας στην πρώτη εξίσωση της (1.50) $v = u$ και παίρνοντας κατόπιν πραγματικά μέρη λαμβάνουμε τη σχέση διατήρησης

$$
\max_{0 \le t \le T} ||u(t)|| = ||u_0||. \tag{1.51}
$$

1.4.1 Το ημιδιακριτό σχήμα

Κατ' αναλογία προς την (1.4) ορίζουμε ως ημιδιακριτή προσέγγιση της ακριβούς λύσης u του προβλήματος (1.49) την απεικόνιση $u_h : [0, T] \to S_h$ που ικανοποιεί το πρόβλημα

$$
\begin{cases} \big(u_{h,t}(t), \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla u_h(t), \nabla \varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t)u_h(t), \varphi\big) = 0,\ \forall \varphi \in S_h,\ 0 \le t \le T, \\ u_h(\cdot, 0) = u_h^0, \end{cases} \tag{1.52}
$$

με τη $u_h^0 \in S_h$ να ικανοποιεί την (1.5).

Η καλή ορισιμότητα της ημιδιακριτής προσέγγισης $u_h : [0, T] \to S_h$ είναι άμεση συνέπεια της Πρότασης 1.1. Όσον αφορά τώρα την ευστάθεια του (1.52) στην L^2-νόρμα, αυτή αποδεικνύεται πολύ πιο απλά σε σχέση με τη γενική περίπτωση, όπως φαίνεται στην πρόταση που ακολουθεί.

Πρόταση 1.5. *Έστω $u_h : [0, T] \to S_h$ η λύση του προβλήματος* (1.52)*. Τότε*

$$
\max_{0 \le t \le T} ||u_h(t)|| = ||u_h^0||, \tag{1.53}
$$

δηλαδή η προσέγγιση u_h ικανοποιεί το ημιδιακριτό ανάλογο της (1.51)*. Επομένως το πρόβλημα* (1.52) *είναι ευσταθές στην L^2-νόρμα.*

Απόδειξη. Θέτουμε στην πρώτη εξίσωση του (1.52) $\varphi = u_h$ και στη συνέχεια λαμβάνουμε πραγματικά μέρη, οπότε παίρνουμε ότι

$$
\frac{d}{dt} ||u_h(t)||^2 = 0,\ \forall t \in [0, T]. \tag{1.54}
$$

Η (1.53) έπεται τώρα άμεσα από την (1.54). □

Θεώρημα 1.3. *Έστω u_h η λύση του προβλήματος (1.52) και έστω ότι η $u_h \in S_h$ ικανοποιεί την (1.5). Αν η λύση του προβλήματος (1.49) είναι αρκετά ομαλή, τότε ισχύει η κάτωθι εκ των προτέρων εκτίμηση σφάλματος*

$$\begin{aligned}\max_{0\le t\le T}||u(t)-u_h(t)|| \le C\big(||u_0||_r + (1+MT)\max_{0\le t\le T}||u(t)||_r \\ + T\max_{0\le t\le T}||u_t(t)||_r\big)h^r,\end{aligned} \tag{1.55}$$

όπου η σταθερά C είναι ανεξάρτητη από το h, τη συνάρτηση g και την ακριβή λύση u.

Απόδειξη. Εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 1.1 και ενθυμούμενοι ότι η συνάρτηση g λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές (και άρα $\mathrm{Im}\big(g(t)\theta(t),\theta(t)\big) = 0,\ t \in [0,T]$), παίρνουμε ότι

$$\frac{d}{dt}||\theta(t)|| \le ||\rho_t|| + M||\rho(t)||,$$

όπου τα θ και ρ ορίζονται όπως στην απόδειξη του προαναφερθέντος θεωρήματος. Επομένως (βλέπε την απόδειξη του Θεωρήματος 1.1) καταλήγουμε στην

$$\begin{aligned}\max_{0\le t\le T}||u(t)-u_h(t)|| \le ||\theta(0)|| + C\big((1+MT)\max_{0\le t\le T}||u(t)||_r \\ + T\max_{0\le t\le T}||u_t(t)||_r\big)h^r.\end{aligned} \tag{1.56}$$

Συνδυάζοντας τις (1.18), (1.5) και (1.56) συμπεραίνουμε την (1.55). □

Παρατήρηση 1.3. Επειδή η συνάρτηση g λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές, στην τελική εκτίμηση (1.55) δεν εμφανίζεται ο όρος e^{MT} ο οποίος εμφανίζεται στην (1.20).

1.4.2 Το πλήρως διακριτό σχήμα

Όπως και στην ενότητα 1.3 έτσι κι εδώ διακριτοποιούμε ως προς το χρόνο το πρόβλημα (1.49) με τη μέθοδο Crank-Nicolson και λαμβάνουμε προσεγγίσεις U^n των $u^n := u(\cdot,t^n),\ n = 0,1,\dots,N$, οι οποίες ικανοποιούν το αριθμητικό σχήμα

$$\begin{cases}\big(\partial U^n,\varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla U^{n+\frac12},\nabla\varphi\big) + \mathrm{i}\big(g(t^{n+\frac12})U^{n+\frac12},\varphi\big) = 0, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \forall\varphi\in S_h,\ n = 0,1\dots,N-1, \\ U^0 := u_h^0.\end{cases} \tag{1.57}$$

Πρόταση 1.6. *Υπάρχουν μοναδικά U^n, $n = 0, 1, \ldots, N$, που ικανοποιούν το πλήρως διακριτό σχήμα* (1.57).

Απόδειξη. Όπως και στην απόδειξη της Πρότασης 1.3 αρκεί να δείξουμε ότι το

$$\frac{1}{k}(U^{n+1}, \varphi) + \frac{\mathrm{i}}{2}(\nabla U^{n+1}, \nabla\varphi) + \frac{\mathrm{i}}{2}\big(g(t^{n+\frac{1}{2}})U^{n+1}, \varphi\big) = 0, \ \forall \varphi \in S_h, \tag{1.58}$$

έχει μόνο την τετριμμένη μηδενική λύση. Θέτοντας στην (1.58) $\varphi = U^{n+1}$ και λαμβάνοντας στη συνέχεια πραγματικά μέρη παίρνουμε ότι $||U^{n+1}||^2 = 0$ απ' όπου έπεται αμέσως ότι $U^{n+1} = 0$. □

Πολύ εύκολα μπορούμε επίσης να αποδείξουμε τη σχέση διατήρησης

$$\max_{0\le n\le N} ||U^n|| = ||u_h^0||, \tag{1.59}$$

η οποία είναι το διακριτό ανάλογο της (1.51). Πράγματι, αρκεί να θέσουμε στην πρώτη εξίσωση του (1.57) $\varphi = U^{n+\frac{1}{2}}$ και να λάβουμε στη συνέχεια πραγματικά μέρη. Από την (1.59) έπεται και η ευστάθεια του πλήρως διακριτού σχήματος ως προς την L^2-νόρμα.

Τέλος, εύκολα μπορούμε να αποδείξουμε την ακόλουθη εκ των προτέρων εκτίμηση.

Θεώρημα 1.4. *Για $n = 0, 1, \ldots, N$, έστω U^n οι προσεγγίσεις που ορίζονται από το σχήμα* (1.57) *και $u^n := u(\cdot, t^n)$, όπου u η ακριβής λύση του προβλήματος* (1.49). *Τότε αν η u είναι αρκετά ομαλή ισχύει η εκτίμηση*

$$\begin{aligned}\max_{0\le n\le N} ||u^n - U^n|| \le C\big\{&||u_0||_r + \big[(1+MT)\max_{0\le t\le T}||u(t)||_r \\ &+ \max_{0\le t\le T}||u_t(t)||_r\big]h^r + T\big[\max_{0\le t\le T}||u_{ttt}(t)|| + \max_{0\le t\le T}||\Delta u_{tt}(t)|| \\ &+ M\max_{0\le t\le T}||u_{tt}(t)||\big]k^2\big\},\end{aligned} \tag{1.60}$$

όπου η σταθερά C είναι ανεξάρτητη από τα h, k, τη συνάρτηση g και την ακριβή λύση u.

Απόδειξη. Αρχικά έχουμε ότι

$$\max_{0\le n\le N} ||u^n - U^n|| \le \max_{0\le n\le N} ||\rho^n|| + \max_{0\le n\le N} ||\theta^n||, \tag{1.61}$$

όπου για $n = 0, 1, \ldots, N$, τα ρ^n και θ^n ορίζονται όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 1.2. Εργαζόμενοι ακριβώς όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 1.2 παίρνουμε ότι

$$\max_{0\le n\le N} ||\theta^n|| \le ||\theta^0|| + T\max_{0\le n\le N-1} ||E^n||, \tag{1.62}$$

όπου για $n = 0, 1, \ldots, N-1$, τα E^n είναι όπως στο Λήμμα 1.1. Συνδυάζοντας τώρα τις (1.5), (1.11), (1.37)-(1.42), (1.44), (1.61) και (1.62) λαμβάνουμε την εκτίμηση (1.60). □

Παρατήρηση 1.4. (Γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου.) Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών-συνοριακών τιμών για τη γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου

$$\begin{cases} u_t^\varepsilon - \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}\Delta u^\varepsilon + \frac{\mathrm{i}}{\varepsilon}V(x)u^\varepsilon = 0, & \text{στο } \bar{\Omega}\times[0,T], \\ u^\varepsilon = 0 & \text{στο } \partial\Omega\times[0,T], \\ u^\varepsilon(\cdot,0) = u_0^\varepsilon & \text{στο } \bar{\Omega}. \end{cases} \tag{1.63}$$

Εφόσον το δυναμικό V λαμβάνει μόνο μη αρνητικές (και άρα πραγματικές) τιμές, παίρνοντας στην πρώτη εξίσωση της (1.63) το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 με τη u^ε και κατόπιν πραγματικά μέρη λαμβάνουμε τη σχέση διατήρησης

$$\max_{0\le t\le T} ||u^\varepsilon(t)|| = ||u_0^\varepsilon||. \tag{1.64}$$

Το πρόβλημα (1.63) μπορεί να θεωρηθεί ως ειδική περίπτωση του προβλήματος (1.49) αντικαθιστώντας όπου Δ και g στο (1.49) $\varepsilon\Delta$ και $\frac{1}{\varepsilon}V$ αντίστοιχα. Έτσι όλα τα αποτελέσματα της ενότητας αυτής ισχύουν και για το πρόβλημα (1.63), φτάνει να αντικαταστήσουμε όπου Δ το $\varepsilon\Delta$ και όπου g το $\frac{1}{\varepsilon}V$. Στη συνέχεια παραθέτουμε χωρίς απόδειξη τα αποτελέσματα που αφορούν το πλήρως διακριτό σχήμα για το πρόβλημα (1.63), για λόγους πληρότητας και διότι θα τα χρησιμοποιήσουμε στο επόμενο κεφάλαιο.

Διακριτοποιώντας το πρόβλημα (1.63) ως προς το χώρο με πεπερασμένα στοιχεία και ως προς το χρόνο με τη μέθοδο Crank-Nicolson λαμβάνουμε για $n = 0, 1, \ldots, N$, προσεγγίσεις $U^{\varepsilon,n} \in S_h$ των $u^{\varepsilon,n} := u^\varepsilon(\cdot, t^n)$ που ικανοποιούν το αναδρομικό σχήμα

$$\begin{cases} \big(\partial U^{\varepsilon,n}, \varphi\big) + \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}\big(\nabla U^{\varepsilon,n+\frac12}, \nabla\varphi\big) + \frac{\mathrm{i}}{\varepsilon}\big(VU^{\varepsilon,n+\frac12}, \varphi\big) = 0 \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \forall\varphi\in S_h,\ n = 0, 1\ldots, N-1, \\ U^{\varepsilon,0} := u_h^{\varepsilon,0}, \end{cases}$$

με τη $u_h^{\varepsilon,0}$ να ικανοποιεί την αντίστοιχη με την (1.5) προσεγγιστική σχέση. Τότε για τις προσεγγίσεις $U^{\varepsilon,n}$, $n = 0, 1, \ldots, N$ ισχύει η σχέση διατήρησης

$$\max_{0\le n\le N} ||U^{\varepsilon,n}|| = ||u_h^{\varepsilon,0}||. \tag{1.65}$$

Επίσης από την (1.60) συμπεραίνουμε την εκ των προτέρων εκτίμηση

$$\begin{aligned}\max_{0\le n\le N}||u^{\varepsilon,n}-U^{\varepsilon,n}|| &\le C\big\{||u_0^\varepsilon||_r+\big[\big(1+\frac{T}{\varepsilon}\sup_{x\in\Omega}V(x)\big)\max_{0\le t\le T}||u^\varepsilon(t)||_r\\ &+\max_{0\le t\le T}||u_t^\varepsilon(t)||_r\big]h^r+T\big[\max_{0\le t\le T}||u_{ttt}^\varepsilon(t)||+\varepsilon\max_{0\le t\le T}||\varDelta u_{tt}^\varepsilon(t)||\\ &+\frac{1}{\varepsilon}\sup_{x\in\Omega}V(x)\max_{0\le t\le T}||u_{tt}^\varepsilon(t)||\big]k^2\big\},\end{aligned} \tag{1.66}$$

όπου η σταθερά C είναι ανεξάρτητη από τα ε, h, k, το δυναμικό V και την ακριβή λύση u^ε.

Κεφάλαιο 2

Η γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου

2.1 Το πρόβλημα

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετήσουμε το πρόβλημα αρχικών-συνοριακών τιμών για τη μονοδιάστατη γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου με περιοδικές συνοριακές συνθήκες

$$(2.1)\qquad \begin{cases} \varepsilon u_t^\varepsilon - \mathrm{i}\dfrac{\varepsilon^2}{2}u_{xx}^\varepsilon + \mathrm{i}V(x)u^\varepsilon = 0 & \text{στο } [a,b]\times[0,T], \\ u^\varepsilon(\cdot,0) = u_0^\varepsilon & \text{στο } [a,b], \\ u^\varepsilon(a,\cdot) = u^\varepsilon(b,\cdot),\ u_x^\varepsilon(a,\cdot) = u_x^\varepsilon(b,\cdot) & \text{στο } [0,T], \end{cases}$$

όπου $[a,b]$ είναι δεδομένο διάστημα και $T<\infty$ επίσης δεδομένο. Το δυναμικό V και η αρχική συνθήκη u_0^ε είναι δεδομένες συναρτήσεις, C^∞ στο $\mathbb{R}$ και $(b-a)-$περιοδικές και το δυναμικό V λαμβάνει μόνο μη αρνητικές τιμές. Πολύ εύκολα μπορούμε και σε αυτή την περίπτωση, των περιοδικών συνοριακών συνθηκών, να δείξουμε ότι η λύση u^ε του προβλήματος (2.1) ικανοποιεί τη σχέση διατήρησης

$$(2.2)\qquad \max_{0\le t\le T} ||u^\varepsilon(t)|| = ||u_0^\varepsilon||.$$

Παρατήρηση 2.1. Θεωρούμε το μονοδιάστατο, ως προς το χώρο, πρόβλημα για ευκολία στους συμβολισμούς. Όλα όμως τα αποτελέσματα του παρόντος κεφαλαίου μπορούν εύκολα να γενικευτούν στις d χωρικές διαστάσεις.

Στα όσα θα ακολουθήσουν, υποθέτουμε ότι για όλους τους μη αρνητικούς ακέραιους m υπάρχουν απόλυτες θετικές σταθερές A_m και B_m ανεξάρτητες του ε τέτοιες ώστε

(Υ1) $||\frac{d^m}{dx^m}u_0^\varepsilon|| \leq \frac{A_m}{\varepsilon^m}$,

(Υ2) $||\frac{d^m}{dx^m}V||_{L^\infty} \leq B_m$.

Σχόλιο 2.1. Για παράδειγμα η υπόθεση (Υ1) ικανοποιείται αν η u_0^ε είναι η WKB αρχική τιμή ημικλασικού τύπου

$$u_0^\varepsilon(x) = \sqrt{n_0(x)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{S_0(x)}{\varepsilon}},\ x \in \mathbb{R},$$

όπου οι συναρτήσεις n_0 και S_0 είναι C^∞ στο $\mathbb{R}$ και $(b-a)-$περιοδικές. Επίσης η συνάρτηση n_0 λαμβάνει μόνο μη αρνητικές τιμές.

Υποθέτουμε ακόμα ότι η ακριβής λύση του προβλήματος (2.1) είναι στοιχείο του χώρου $C^{\infty,\infty}(\mathbb{R}\times\mathbb{R})$ και $(b-a)-$περιοδική και ότι για κάθε $m_1, m_2 \in \mathbb{N}_0$ υπάρχουν απόλυτες σταθερές $E_{m_1+m_2}$ ανεξάρτητες του ε τέτοιες ώστε

(Υ3) $\max_{0\leq t\leq T}||\frac{\partial^{m_1+m_2}}{\partial x^{m_1}\partial t^{m_2}}u^\varepsilon(t)|| \leq \frac{E_{m_1+m_2}}{\varepsilon^{m_1+m_2}}$.

Θεωρούμε ομοιόμορφους διαμερισμούς των διαστημάτων $[a,b]$ και $[0,T]$ με χωρικό και χρονικό βήμα h και k αντίστοιχα. Πιο συγκεκριμένα, έστω $h := \frac{b-a}{M}$, όπου υποθέτουμε επιπλέον ότι το M είναι άρτιος φυσικός αριθμός και έστω $x_j := a+jh$, $j = 0,1,\ldots,M$. Έστω επίσης $k := \frac{T}{N}$, $N \in \mathbb{N}$ και $t^n = nk$, $n = 0,1,\ldots,N$, οι κόμβοι.

Στις πλείστες περιπτώσεις του κεφαλαίου αυτού θα χρειασθεί να υποθέσουμε ότι το χωρικό και χρονικό βήμα επιλέγονται έτσι ώστε

(Υ4) $\frac{h}{\varepsilon} = O(1)$ και $\frac{k}{\varepsilon} = O(1)$.

Στο κεφάλαιο αυτό, αρχικά, θα χρησιμοποιήσουμε τα αποτελέσματα της τελευταίας ενότητας για τη διακριτοποίηση του προβλήματος (2.1) με τη μέθοδο Crank-Nicolson ως προς το χρόνο και τα πεπερασμένα στοιχεία ως προς το χώρο και υπό τις προϋποθέσεις (Υ1)-(Υ3) θα μελετήσουμε την εξάρτηση του χωρικού και χρονικού βήματος από την παράμετρο ε, έτσι ώστε να έχουμε σύγκλιση της μεθόδου. Οι συνθήκες που θα αποδείξουμε θα είναι περιοριστικές.

Προσπαθώντας να ξεπεράσουμε τη δυσκολία αυτή, θα οδηγηθούμε στις μεθόδους splitting. Οι μέθοδοι splitting είναι μέθοδοι διακριτοποίησης ως προς το χρόνο, κατάλληλες για τη διακριτοποίηση του προβλήματος (2.1). Θα εξηγήσουμε τα πλεονεκτήματα των μεθόδων αυτών σε σχέση με τις μεθόδους Runge-Kutta για τη διακριτοποίηση του προβλήματος (2.1).

Τέλος θα θεωρήσουμε το πλήρως διακριτό σχήμα, στο οποίο η διακριτοποίηση ως προς το χώρο θα γίνει με φασματικές μεθόδους και ως προς το χρόνο με τη μέθοδο splitting του Lie και τη μέθοδο splitting του Strang. Το βασικό αποτέλεσμα της τελευταίας ενότητας θα είναι μια εκ των προτέρων εκτίμηση στην L^2-νόρμα. Η σημαντικότητα της εκτίμησης αυτής σε σχέση με την αντίστοιχη εκτίμηση όπου η διακριτοποίηση γίνεται με πεπερασμένα στοιχεία και τη μέθοδο Crank-Nicolson, είναι ότι για να εξασφαλίσουμε σύγκλιση των splitting-φασματικών μεθόδων, χρειαζόμαστε λιγότερο περιοριστικές συνθήκες στην επιλογή του χωρικού και χρονικού βήματος σε σχέση με το ε.

2.2 Πεπερασμένα στοιχεία και μέθοδος Crank-Nicolson

Στην Παρατήρηση 1.4 μελετήσαμε το πλήρως διακριτό σχήμα για το πρόβλημα (2.1) στο οποίο η διακριτοποίηση ως προς το χώρο έγινε με πεπερασμένα στοιχεία και η διακριτοποίηση ως προς το χρόνο έγινε με τη μέθοδο Crank-Nicolson. Η μοναδική διαφορά του προβλήματος (1.63) με το πρόβλημα (2.1) είναι οι συνοριακές συνθήκες: Στο πρόβλημα (1.63) έχουμε μηδενικές συνοριακές συνθήκες, ενώ στο πρόβλημα (2.1) οι συνοριακές συνθήκες είναι περιοδικές. Αλλάζοντας λοιπόν κατάλληλα τους χώρους H_0^1 και S_h και τον ορισμό της ελλειπτικής προβολής R_h, ώστε να υπάρχει συμφωνία με τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες, και εργαζόμενοι ακριβώς όπως στο πρώτο κεφάλαιο, παίρνουμε αντίστοιχες εκτιμήσεις. Έτσι, η ευστάθεια για το αριθμητικό σχήμα, καθώς επίσης και το διακριτό ανάλογο της σχέσης διατήρησης (2.2) προκύπτουν από τη σχέση (1.65). Επίσης, πολύ εύκολα, μπορούμε να αποδείξουμε το επόμενο αποτέλεσμα.

Θεώρημα 2.1. *Για $n = 0, 1, \dots, N$, έστω $U^{\varepsilon,n} \in S_h$ οι προσεγγίσεις στους κόμβους t^n της ακριβούς λύσης u^ε του προβλήματος* (2.1) *που λαμβάνουμε όταν δακριτοποιήσουμε με πεπερασμένα στοιχεία και τη μέθοδο Crank-Nicolson το πρόβλημα* (2.1). *Τότε υπό τις προϋποθέσεις (Υ1)-(Υ3) ισχύει η εκτίμηση*

$$\max_{0\le n\le N} ||u^\varepsilon(t^n) - U^{\varepsilon,n}|| \le C_r \frac{h^r}{\varepsilon^{r+1}} + C\frac{k^2}{\varepsilon^3}, \tag{2.3}$$

όπου η σταθερά C_r είναι ανεξάρτητη από τα ε, h και k και η σταθερά C ανεξάρτητη από τα r, ε, h και k.

Απόδειξη. Η (2.3) προκύπτει από την εφαρμογή των υποθέσεων (Υ1)-(Υ3) στην (1.66). □

Παρατήρηση 2.2. *(Επιλογή χωρικού και χρονικού βήματος σε σχέση με το ε.)* Έστω ότι θέλουμε να ισχύει η

$$\max_{0\le n\le N} ||u^{\varepsilon}(t^n) - U^{\varepsilon,n}|| \le \delta,$$

όπου $\delta > 0$ ένα επιθυμητό άνω φράγμα για το σφάλμα. Τότε σύμφωνα με τη (2.3), αρκεί να ακολουθήσουμε την παρακάτω στρατηγική επιλογής χωρικού και χρονικού βήματος σε σχέση με το ε:

$$\text{(a) } k = O\big((\delta\varepsilon^3)^{1/2}\big) \ \text{ και } \ \text{(b) } h = O\big((\delta\varepsilon^{r+1})^{1/r}\big). \tag{2.4}$$

Οι συνθήκες αυτές είναι αρκετά περιοριστικές ιδιαίτερα στην περίπτωση που η τιμή της σταθεράς του Planck είναι κοντά στο μηδέν.

2.3 Μέθοδοι splitting

Έστω $\mathbf{C}$ ένας γραμμικός τελεστής. Για $t \in (t^n, t^{n+1}]$, $n = 0, 1, \ldots, N-1$, συμβολίζουμε με $\mathrm{e}^{(t-t^n)\mathbf{C}}\omega^n$ τη λύση του προβλήματος αρχικών τιμών

$$\begin{cases} \omega_t = \mathbf{C}\omega \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \omega(t^n) = \omega^n. \end{cases} \tag{2.5}$$

Η κεντρική ιδέα των μεθόδων splitting είναι να γράψουμε τον τελεστή $\mathbf{C}$ ως άθροισμα απλούστερων τελεστών $\mathbf{C}_i$, $i = 1, \ldots, P$, $\mathbf{C} = \sum_{i=1}^{P} \mathbf{C}_i$. Στη συνέχεια προσεγγίζουμε την ακριβή λύση του προβλήματος (2.5) στο t^{n+1}, $\omega(t^{n+1}) = \mathrm{e}^{k\mathbf{C}}\omega^n$ με την $\omega^{n+1} = \mathrm{e}^{k\mathbf{C}_p} \cdots \mathrm{e}^{k\mathbf{C}_1}\omega^n$. Με άλλα λόγια επιλύουμε διαδοχικά τα παρακάτω, πιο απλά, P προβλήματα αρχικών τιμών

$$\begin{cases} \omega_{1,t} = \mathbf{C}_1\omega_1 \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \omega_1(t^n) = \omega^n, \end{cases}$$

και για $i = 2, 3 \ldots, P$,

$$\begin{cases} \omega_{i,t} = \mathbf{C}_i\omega_i \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \omega_i(t^n) = \mathrm{e}^{k\mathbf{C}_{i-1}} \cdots \mathrm{e}^{k\mathbf{C}_1}\omega^n. \end{cases}$$

Σχόλιο 2.2. Το σφάλμα $\omega(t^n)-\omega^n$ στις μεθόδους splitting είναι μηδέν αν και μόνο αν οι τελεστές $\mathbf{C}_i$, $i=1,\dots,P$, είναι ανά δύο αντιμεταθέσιμοι.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τις δύο πιο γνωστές μεθόδους splitting για το πρόβλημα (2.5): Τη μέθοδο splitting του Lie και τη μέθοδο splitting του Strang. Για το σκοπό αυτό ορίζουμε τους τελεστές

$$\mathcal{A}^\varepsilon = \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}\partial_{xx} \text{ και } \mathcal{B}^\varepsilon = -\mathrm{i}\frac{V(x)}{\varepsilon} \tag{2.6}$$

Είναι γνωστό ότι η μέθοδος splitting του Lie είναι πρώτης τάξης ακρίβειας, ενώ η μέθοδος splitting του Strang δεύτερης (βλέπε για παράδειγμα [19], [20] και [21] για τη μη γραμμική περίπτωση). Παρακάτω θα εξηγήσουμε γιατί αναμένουμε η μέθοδος splitting του Lie να είναι πρώτης τάξης ακρίβειας και πώς εξαρτάται το χρονικό βήμα από τη σταθερά ε. Επίσης θα εξηγήσουμε γιατί δεν μπορούμε να συνδυάσουμε τη μέθοδο splitting του Lie (και κατ' επέκταση τη μέθοδο splitting του Strang) με οποιαδήποτε μέθοδο Runge-Kutta.

2.3.1 Η μέθοδος splitting του Lie

Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\begin{cases} \upsilon_t = (\mathbf{A}+\mathbf{B})\upsilon \quad \text{στο } [0,T], \\ \upsilon(0) = \upsilon_0, \end{cases} \tag{2.7}$$

όπου $\mathbf{A}$ και $\mathbf{B}$ είναι γραμμικοί τελεστές. Τότε για $n=0,1,\dots,N-1$, η ακριβής λύση του προβλήματος (2.7) δίνεται από

$$\upsilon(t^{n+1}) = \mathrm{e}^{k(\mathbf{A}+\mathbf{B})}\upsilon(t^n).$$

Η μέθοδος splitting του Lie δίνεται από το σχήμα

$$\begin{cases} \upsilon^{n+1} = \mathrm{e}^{k\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}}\upsilon^n, \quad n=0,1,\dots,N-1, \\ \upsilon^0 = \upsilon_0, \end{cases} \tag{2.8}$$

δηλαδή σε κάθε βήμα n, $n=0,1,\dots,N-1$, επιλύουμε πρώτα το πρόβλημα

$$\begin{cases} \upsilon_{1,t} = \mathbf{A}\upsilon_1 \quad \text{στο } (t^n,t^{n+1}], \\ \upsilon_1(t^n) = \upsilon^n. \end{cases}$$

και στη συνέχεια το

$$\begin{cases} \upsilon_{2,t} = \mathbf{B}\upsilon_2 \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \upsilon_2(t^n) = \upsilon_1(t^{n+1}). \end{cases}$$

Τότε $\upsilon^{n+1} = \upsilon_2(t^{n+1})$.

- **Τοπικό σφάλμα**

Αναπτύσσουμε σε σειρά Taylor τις ποσότητες $\mathrm{e}^{k\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}}$ και $\mathrm{e}^{k(\mathbf{A}+\mathbf{B})}$ και λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{k\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}} &= (\mathbf{I} + k\mathbf{B} + \frac{k^2}{2}\mathbf{B}^2 + \frac{k^3}{6}\mathbf{B}^3 + \cdots)(\mathbf{I} + k\mathbf{A} + \frac{k^2}{2}\mathbf{A}^2 + \frac{k^3}{6}\mathbf{A}^3 + \cdots) \\ &= \mathbf{I} + k(\mathbf{A}+\mathbf{B}) + \frac{k^2}{2}(\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 + 2\mathbf{BA}) + \frac{k^3}{6}(\mathbf{A}^3 + \mathbf{B}^3 + 3\mathbf{B}^2\mathbf{A} + 3\mathbf{BA}^2) + \cdots \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{k(\mathbf{A}+\mathbf{B})} &= \mathbf{I} + k(\mathbf{A}+\mathbf{B}) + \frac{k^2}{2}(\mathbf{A}+\mathbf{B})^2 + \frac{k^3}{6}(\mathbf{A}+\mathbf{B})^3 + \cdots \\ &= \mathbf{I} + k(\mathbf{A}+\mathbf{B}) + \frac{k^2}{2}(\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 + \mathbf{AB} + \mathbf{BA}) \\ &+ \frac{k^3}{6}(\mathbf{A}^3 + \mathbf{B}^3 + \mathbf{A}^2\mathbf{B} + \mathbf{B}^2\mathbf{A} + \mathbf{ABA} + \mathbf{AB}^2 + \mathbf{BA}^2 + \mathbf{BAB}) + \cdots \end{aligned}$$

Επομένως

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{k(\mathbf{A}+\mathbf{B})} - \mathrm{e}^{k\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}} &= \frac{k^2}{2}(\mathbf{AB} - \mathbf{BA}) + \frac{k^3}{6}(\mathbf{A}^2\mathbf{B} + \mathbf{ABA} - 2\mathbf{BA}^2) \\ &+ \frac{k^3}{6}(\mathbf{AB}^2 + \mathbf{BAB} - 2\mathbf{B}^2\mathbf{A}) + O(k^4). \end{aligned} \tag{2.9}$$

Έστω ότι στο βήμα n γνωρίζουμε την ακριβή λύση $\upsilon(t^n)$ του προβλήματος (2.7). Τότε λόγω της (2.9)

$$\begin{aligned} \upsilon(t^{n+1}) - \upsilon^{n+1} &= (\mathrm{e}^{k(\mathbf{A}+\mathbf{B})} - \mathrm{e}^{k\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}})\upsilon(t^n) = \big[\frac{k^2}{2}(\mathbf{AB} - \mathbf{BA}) + \frac{k^3}{6}(\mathbf{A}^2\mathbf{B} \\ &+ \mathbf{ABA} - 2\mathbf{BA}^2) + \frac{k^3}{6}(\mathbf{AB}^2 + \mathbf{BAB} - 2\mathbf{B}^2\mathbf{A})\big]\upsilon(t^n) + O(k^4). \end{aligned} \tag{2.10}$$

Επομένως η μέθοδος splitting του Lie είναι τοπικά δεύτερης τάξης.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι $\mathbf{A} = \mathcal{A}^\varepsilon$ και $\mathbf{B} = \mathcal{B}^\varepsilon$ όπου οι τελεστές $\mathcal{A}^\varepsilon$ και $\mathcal{B}^\varepsilon$ δίνονται από τη (2.6) και έστω ότι εφαρμόζουμε τη μέθοδο splitting του Lie στο πρόβλημα (2.1). Δηλαδή διακριτοποιούμε το πρόβλημα (2.1) μόνο ως προς το χρόνο με τη μέθοδο splitting του Lie. Έστω $u^\varepsilon(x,t^n)$, $x\in[a,b]$, η ακριβής λύση στον κόμβο t^n του προβλήματος (2.1). Για κάθε $s\in\mathbb{N}$, έχουμε ότι

$$(\mathcal{A}^\varepsilon)^s u^\varepsilon(x,t^n) = (\mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2})^s \frac{\partial^{2s}}{\partial x^{2s}} u^\varepsilon(x,t^n),$$

και

$$(\mathcal{B}^\varepsilon)^s u^\varepsilon(x,t^n) = (-\mathrm{i}\frac{V(x)}{\varepsilon})^s u^\varepsilon(x,t^n).$$

Επομένως, σύμφωνα με τις υποθέσεις (Υ2) και (Υ3) λαμβάνουμε για κάθε $s\in\mathbb{N}$ ότι

$$||(\mathcal{A}^\varepsilon)^s u^\varepsilon(t^n)|| = O(\frac{1}{\varepsilon^s})$$

και

$$||(\mathcal{B}^\varepsilon)^s u^\varepsilon(t^n)|| \le \frac{1}{\varepsilon^s}||V||^s_{L^\infty}||u^\varepsilon(t^n)|| = O(\frac{1}{\varepsilon^s}).$$

Από τη (2.10) παρατηρούμε ότι για $s=2$ ή 3 οι όροι $(\mathcal{A}^\varepsilon)^2$, $(\mathcal{B}^\varepsilon)^2$, $(\mathcal{A}^\varepsilon)^3$ και $(\mathcal{B}^\varepsilon)^3$ απαλείφονται. Γενικά μπορούμε, για κάθε $s\in\mathbb{N}$, να αποδείξουμε ότι οι όροι $(\mathcal{A}^\varepsilon)^s$ και $(\mathcal{B}^\varepsilon)^s$ απαλείφονται.

Επίσης χρησιμοποιώντας τους κανόνες παραγώγισης Leibniz λαμβάνουμε

$$\begin{aligned}(\mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon - \mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon)u^\varepsilon(x,t^n) &= \big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(V(x)u^\varepsilon(x,t^n)\big) - V(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}u^\varepsilon(x,t^n)\big)\\ &= u^\varepsilon(x,t^n)\frac{d^2}{dx^2}V(x) + 2\frac{d}{dx}V(x)\frac{\partial}{\partial x}u^\varepsilon(x,t^n),\end{aligned}$$

και άρα λόγω των (Υ2) και (Υ3)

$$||(\mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon - \mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon)u^\varepsilon(t^n)|| = O(\frac{1}{\varepsilon}).$$

Μια σημαντική παρατήρηση είναι ότι ο όρος $V(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}u^\varepsilon(x,t^n)$ που είναι, σύμφωνα με τις (Υ2) και (Υ3), ως προς την L^2-νόρμα, τάξης $\frac{1}{\varepsilon^2}$ απαλείφεται.

Ομοίως, χρησιμοποιώντας και πάλι τους κανόνες παραγώγισης Leibniz λαμβάνουμε

$$\begin{aligned}&\big[(\mathcal{A}^\varepsilon)^2\mathcal{B}^\varepsilon + \mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon - 2\mathcal{B}^\varepsilon(\mathcal{A}^\varepsilon)^2\big]u^\varepsilon(x,t^n)\\ &= \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{4}\big[u^\varepsilon(x,t^n)\frac{d^4}{dx^4}V(x) + 4\frac{d^3}{dx^3}V(x)\frac{\partial}{\partial x}u^\varepsilon(x,t^n)\\ &+ 7\frac{d^2}{dx^2}V(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}u^\varepsilon(x,t^n) + 6\frac{d}{dx}V(x)\frac{\partial^3}{\partial x^3}u^\varepsilon(x,t^n)\big],\end{aligned}$$

και

$$\big[\mathcal{A}^\varepsilon(\mathcal{B}^\varepsilon)^2+\mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon-2(\mathcal{B}^\varepsilon)^2\mathcal{A}^\varepsilon\big]u^\varepsilon(x,t^n)=-\frac{\mathrm{i}}{2\varepsilon}\big[2(\frac{d}{dx}V(x))^2u^\varepsilon(x,t^n)$$
$$+3u^\varepsilon(x,t^n)V(x)\frac{d^2}{dx^2}V(x)+6V(x)\frac{d}{dx}V(x)\frac{\partial}{\partial x}u^\varepsilon(x,t^n)\big].$$

Συνεπώς από τις υποθέσεις (Υ2) και (Υ3) παίρνουμε ότι

$$||\big[(\mathcal{A}^\varepsilon)^2\mathcal{B}^\varepsilon+\mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon-2\mathcal{B}^\varepsilon(\mathcal{A}^\varepsilon)^2\big]u^\varepsilon(x,t^n)||=O(\frac{1}{\varepsilon^2}),$$

και

$$||\big[\mathcal{A}^\varepsilon(\mathcal{B}^\varepsilon)^2+\mathcal{B}^\varepsilon\mathcal{A}^\varepsilon\mathcal{B}^\varepsilon-2(\mathcal{B}^\varepsilon)^2\mathcal{A}^\varepsilon\big]u^\varepsilon(x,t^n)||=O(\frac{1}{\varepsilon^2}).$$

Παρατηρηρούμε πάλι ότι οι όροι $\mathrm{i}\frac{\varepsilon}{4}V(x)\frac{\partial^4}{\partial x^4}u^\varepsilon(x,t^n)$ και $-\frac{\mathrm{i}}{2\varepsilon}V^2(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}u^\varepsilon(x,t^n)$ που είναι τάξης $\frac{1}{\varepsilon^3}$ ως προς την L^2- νόρμα απαλείφονται. Γενικότερα, για κάθε $s\geq 2, s\in\mathbb{N}$, μπορούμε, χρησιμοποιώντας τους κανόνες παραγώγισης Leibniz και τις υποθέσεις (Υ2) και (Υ3), να αποδείξουμε ότι ο συντελεστής του k^s στο ανάπτυγμα $(\mathrm{e}^{k(\mathcal{A}^\varepsilon+\mathcal{B}^\varepsilon)}-\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon})u^\varepsilon(x,t^n)$ είναι, ως προς την L^2-νόρμα, τάξεως $\frac{1}{\varepsilon^{s-1}}$. Επομένως, χρησιμοποιώντας τη (2.10) για $\mathbf{A}=\mathcal{A}^\varepsilon$, $\mathbf{B}=\mathcal{B}^\varepsilon$ και $\upsilon(t^n)=u^\varepsilon(x,t^n)$ την ακριβή λύση του προβλήματος (2.1) στο t^n και την παραπάνω ανάλυση συμπεραίνουμε, υπό τις προϋποθέσεις (Υ2)-(Υ4), ότι για $n=0,1,\ldots,N-1$, ισχύει

$$||u^\varepsilon(t^{n+1})-u^{\varepsilon,n+1}||=||(\mathrm{e}^{k(\mathcal{A}^\varepsilon+\mathcal{B}^\varepsilon)}-\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon})u^\varepsilon(t^n)||=O(\frac{k^2}{\varepsilon}),\tag{2.11}$$

όπου $u^\varepsilon(\cdot,t^{n+1})$ είναι η ακριβής λύση του προβλήματος (2.1) στον κόμβο t^{n+1} και $u^{\varepsilon,n+1}$ είναι η προσέγγιση που λαμβάνουμε όταν εφαρμόσουμε από το t^n στο t^{n+1} τη μέθοδο splitting του Lie στο πρόβλημα (2.1) υποθέτοντας ότι γνωρίζουμε την ακριβή λύση $u^\varepsilon(\cdot,t^n)$ στον κόμβο t^n.

Συνεπώς το κύριο πλεονέκτημα της μεθόδου splitting του Lie, όταν αυτή εφαρμόζεται στο πρόβλημα (2.1), είναι ότι δίνει τοπικό σφάλμα τάξης $\frac{k^2}{\varepsilon}$ αντί για $\frac{k^2}{\varepsilon^2}$.

Παρατήρηση 2.3. *(Splitting Vs Runge-Kutta.)* Όπως εξηγήσαμε παραπάνω, η εφαρμογή της μεθόδου splitting του Lie για το πρόβλημα (2.1) από το χρόνο t^n στο t^{n+1} έχει ως αποτέλεσμα την ακριβή επίλυση (ως προς το χρόνο) των προβλημάτων

$$\begin{cases}\varepsilon u^\varepsilon_{1,t}-\mathrm{i}\dfrac{\varepsilon^2}{2}u^\varepsilon_{1,xx}=0 \quad \text{στο } [a,b]\times(t^n,t^{n+1}],\\ u^\varepsilon_1(t^n)=u^{\varepsilon,n},\end{cases}\tag{2.12}$$

$$
(2.13) \qquad \begin{cases} \varepsilon u^{\varepsilon}_{2,t} + \mathrm{i}V(x)u^{\varepsilon}_2 = 0 \quad \text{στο } [a,b]\times(t^n,t^{n+1}],\\ u^{\varepsilon}_2(t^n) = u^{\varepsilon}_1(t^{n+1}). \end{cases}
$$

Το πρόβλημα (2.13) μπορεί να επιλυθεί ακριβώς χωρίς καμιά δυσκολία. Από την άλλη μεριά, για να μπορέσουμε να επιλύσουμε ακριβώς το πρόβλημα (2.12) ως προς το χρόνο πρέπει να θεωρήσουμε κατάλληλη διακριτοποίηση του προβλήματος ως προς το χώρο. Αυτό θα είναι και το κύριο αντικείμενο της επόμενης ενότητας. Παρόλα αυτά τίθεται το ερώτημα κατά πόσο μπορούμε να προσεγγίσουμε τη λύση του προβλήματος (2.12) χρησιμοποιώντας, για παράδειγμα, μια μέθοδο Runge-Kutta (R-K), διατηρώντας όμως ταυτόχρονα το πλεονέκτημα της μεθόδου splitting ως προς την εξάρτηση του χρονικού βήματος από το ε (βλέπε τη (2.11)). Η απάντηση στο ερώτημα αυτό είναι αρνητική. Πράγματι έστω ότι προσεγγίζουμε τη λύση του προβλήματος (2.12) με μια μέθοδο R-K τάξης p και έστω r η ρητή προσέγγιση που αντιστοιχεί σε αυτή. Τότε η νέα μέθοδος δίνεται, για $x\in[a,b]$, από το σχήμα

$$
\begin{cases} \tilde{u}^{\varepsilon,n+1}(x) = \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^{\varepsilon}}\mathrm{r}(k\mathcal{A}^{\varepsilon})\tilde{u}^{\varepsilon,n}(x),\ n=0,1,\dots,N-1,\\ \tilde{u}^{\varepsilon,0}(x) = u^{\varepsilon}_0(x), \end{cases}
$$

όπου

$$
\mathrm{r}(k\mathcal{A}^{\varepsilon}) = \mathbf{I} + k\mathcal{A}^{\varepsilon} + \frac{k^2}{2}(\mathcal{A}^{\varepsilon})^2 + \cdots + \frac{k^p}{p!}(\mathcal{A}^{\varepsilon})^p + \tilde{C}_{p+1}k^{p+1}(\mathcal{A}^{\varepsilon})^{p+1} + \cdots
$$

με

$$
\tilde{C}_{p+1} \neq \frac{1}{(p+1)!}.
$$

Συνεπώς αναπτύσσοντας σε σειρά Taylor το τοπικό σφάλμα $\big(\mathrm{e}^{k(\mathcal{A}^{\varepsilon}+\mathcal{B}^{\varepsilon})} - \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^{\varepsilon}}\mathrm{r}(k\mathcal{A}^{\varepsilon})\big)$ $u^{\varepsilon}(x,t^n)$ λαμβάνουμε μη μηδενικό συντελεστή για το $(\mathcal{A}^{\varepsilon})^{p+1}$. Όμως

$$
||(\mathcal{A}^{\varepsilon})^{p+1}u^{\varepsilon}(t^n)|| = O(\frac{1}{\varepsilon^{p+1}}),
$$

και άρα υπό τις προϋποθέσεις (Υ2) και (Υ3)

$$
||\big(\mathrm{e}^{k(\mathcal{A}^{\varepsilon}+\mathcal{B}^{\varepsilon})} - \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^{\varepsilon}}\mathrm{r}(k\mathcal{A}^{\varepsilon})\big)u^{\varepsilon}(t^n)|| = C_2\frac{k^2}{\varepsilon} + \cdots + C_p\frac{k^p}{\varepsilon^{p-1}} + C_{p+1}\frac{k^{p+1}}{\varepsilon^{p+1}} + \cdots
$$

Επομένως, υπό την προϋπόθεση (Υ4), ο κυρίαρχος όρος για ε μικρό, είναι ο $\frac{k^{p+1}}{\varepsilon^{p+1}}$ και όχι ο $\frac{k^2}{\varepsilon}$, όπως προηγουμένως. Ο συνδυασμός λοιπόν της μεθόδου splitting του Lie (και γενικότερα κάθε μεθόδου splitting) με οποιαδήποτε μέθοδο R-K για την αριθμητική (ως προς το χρόνο) επίλυση του προβλήματος (2.1), αναιρεί το πλεονέκτημα που έχει η μέθοδος splitting ως προς την επιλογή του χρονικού βήματος σε σχέση με το ε.

2.3.2 Η μέθοδος splitting του Strang

Μια άλλη πολύ γνωστή μέθοδος splitting για τη διακριτοποίηση του προβλήματος (2.7) είναι η μέθοδος splitting του Strang. Στην περίπτωση αυτή από το t^n στο t^{n+1} επιλύουμε τα προβλήματα

$$\begin{cases} \upsilon_{1,t} = \dfrac{1}{2}\mathbf{B}\upsilon_1 \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \upsilon_1(t^n) = \upsilon^n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \upsilon_{2,t} = \mathbf{A}\upsilon_2 \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \upsilon_2(t^n) = \upsilon_1(t^{n+1}), \end{cases}$$

και

$$\begin{cases} \upsilon_{3,t} = \dfrac{1}{2}\mathbf{B}\upsilon_3 \quad \text{στο } (t^n, t^{n+1}], \\ \upsilon_3(t^n) = \upsilon_2(t^{n+1}). \end{cases}$$

Τότε $\upsilon^{n+1} = \upsilon_3(t^{n+1})$.

Συνοπτικά το αριθμητικό σχήμα δίνεται από

$$\begin{cases} \upsilon^{n+1} = \mathrm{e}^{\frac{k}{2}\mathbf{B}}\mathrm{e}^{k\mathbf{A}}\mathrm{e}^{\frac{k}{2}\mathbf{B}}\upsilon^n, \ n = 0, 1, \ldots, N-1, \\ \upsilon^0 = \upsilon_0. \end{cases}$$

Η μέθοδος splitting του Strang είναι τοπικά τρίτης τάξης. Επίσης εργαζόμενοι όπως και στη μέθοδο splitting του Lie και υπό τις προϋποθέσεις (Υ2)-(Υ4), λαμβάνουμε κατά αναλογία προς τη (2.11) την

$$(2.14) \qquad ||u^\varepsilon(t^{n+1}) - u^{\varepsilon,n+1}|| = ||(\mathrm{e}^{k(\mathcal{A}^\varepsilon+\mathcal{B}^\varepsilon)} - \mathrm{e}^{\frac{k}{2}\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}\mathrm{e}^{\frac{k}{2}\mathcal{B}^\varepsilon})u^\varepsilon(t^n)|| = O(\frac{k^3}{\varepsilon}),$$

όπου $u^\varepsilon(x,t)$, $x \in [a,b]$, $t \in [0,T]$, η ακριβής λύση του προβλήματος (2.1), $u^{\varepsilon,n}(x)$, $x \in [a,b]$, $n = 0, 1, \ldots, N$, οι προσεγγίσεις που λαμβάνουμε από τη μέθοδο splitting του Strang όταν αυτή εφαρμοσθεί στο πρόβλημα (2.1) και οι τελεστές $\mathcal{A}^\varepsilon$ και $\mathcal{B}^\varepsilon$ ορίζονται στη (2.6).

2.4 Μέθοδοι splitting και φασματικές μέθοδοι

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε το πλήρως διακριτό σχήμα για το πρόβλημα (2.1) με διακριτοποίηση ως προς το χρόνο τη μέθοδο splitting του Lie (και τη μέθοδο splitting του Strang), ενώ η διακριτοποίηση ως προς το χώρο θα γίνει με φασματικές μεθόδους. Οι μέθοδοι διακριτοποίησης και τα αποτελέσματα που θα παρουσιάσουμε είναι παρμένα από το άρθρο [7]. Επίσης οι ίδιες μέθοδοι έχουν μελετηθεί για τη μη γραμμική περίπτωση στο [16].

Η κύρια ιδέα της Lie splitting φασματικής μεθόδου είναι ότι από το t^n στο t^{n+1} η εξίσωση στο πρόβλημα (2.12) θα διακριτοποιηθεί ως προς το χώρο με τη φασματική μέθοδο και στη συνέχεια θα επιλυθεί ακριβώς ως προς το χρόνο, και η εξίσωση (2.13) θα επιλυθεί ακριβώς. Με άλλα λόγια, η Lie splitting φασματική μέθοδος έχει ένα ενδιάμεσο βήμα και περιγράφεται αναλυτικά, για $j = 0, 1, \dots, M-1$ και $n = 0, 1, \dots, N-1$, από το σχήμα

$$
\begin{cases}
U_j^{\varepsilon,*} = \dfrac{1}{M} \displaystyle\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon k \mu_\ell^2/2} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell (x_j - a)}, \\
U_j^{\varepsilon,n+1} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)k/\varepsilon} U_j^{\varepsilon,*},
\end{cases} \tag{2.15}
$$

με

$$U_j^{\varepsilon,0} = u_0^\varepsilon(x_j),$$

και για $\ell = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2} - 1$,

$$\mu_\ell = \frac{2\pi\ell}{b-a}$$

και

$$\hat{U}_\ell^{\varepsilon,n} = \sum_{j=0}^{M-1} U_j^{\varepsilon,n} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell (x_j - a)}. \tag{2.16}$$

Για $x \in [a, b]$ και $n = 0, 1, \dots, N$, οι προσεγγίσεις $U_I^{\varepsilon,n}(x)$ της ακριβούς λύσης $u^\varepsilon(x, t^n)$ του προβλήματος (2.1) στους κόμβους t^n ορίζονται ως

$$U_I^{\varepsilon,n} = \frac{1}{M} \sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell (\cdot - a)}. \tag{2.17}$$

Κατά αναλογία τώρα, η Strang splitting φασματική μέθοδος έχει δύο ενδιάμεσα βήματα και περιγράφεται για $j = 0, 1, \dots, M-1$ και $n = 0, 1 \dots, N-1$, από το σχήμα

$$\tag{2.18} \begin{cases} U_j^{\varepsilon,*} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)\frac{k}{2\varepsilon}} U_j^{\varepsilon,n}, \\ U_j^{\varepsilon,**} = \dfrac{1}{M} \displaystyle\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\frac{k}{2}\mu_\ell^2} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,*} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)}, \\ U_j^{\varepsilon,n+1} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)\frac{k}{2\varepsilon}} U_j^{\varepsilon,**}, \end{cases}$$

με $U_j^{\varepsilon,0} = u_0^\varepsilon(x_j)$ και για $\ell = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2} - 1$, τα μ_ℓ δίνονται όπως πριν και

$$\hat{U}_\ell^{\varepsilon,*} = \sum_{j=0}^{M-1} U_j^{\varepsilon,*} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)}.$$

Και πάλι για $x \in [a,b]$ και $n = 0, 1, \dots, N$, οι προσεγγίσεις της ακριβούς λύσης u^ε στους κόμβους t^n δίνονται από τη (2.17) με τα $\hat{U}_\ell^{\varepsilon,n}$, $\ell = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2}-1$, να ορίζονται όπως στην (2.16) και τα $U_j^{\varepsilon,n}$, $j = 0, 1, \dots, M-1$, να ορίζονται μέσω της (2.18).

Στην περίπτωση που το δυναμικό $V(x)$, $x \in [a,b]$, είναι σταθερή συνάρτηση, δηλαδή $V(x) = V$ για κάθε $x \in [a,b]$, οι τελεστές $\mathcal{A}^\varepsilon$ και $\mathcal{B}^\varepsilon$ που ορίζονται στη (2.6) είναι αντιμεταθέσιμοι και άρα το σφάλμα που προέρχεται από τις μεθόδους splitting είναι μηδέν· με άλλα λόγια δε γίνεται διακριτοποίηση ως προς το χρόνο. Συνεπώς οι μέθοδοι (2.15) και (2.18) δεν έχουν στην περίπτωση αυτή ενδιάμεσα βήματα και η Lie splitting φασματική μέθοδος και η Strang splitting φασματική μέθοδος ταυτίζονται και γράφονται απλούστερα για $j = 0, 1, \dots, M-1$ και $n = 0, 1, \dots, N$, ως

$$\tag{2.19} U_j^{\varepsilon,n} = \frac{1}{M} \sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varepsilon\frac{\mu_\ell^2}{2}+\frac{V}{\varepsilon})t^n} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)},$$

με

$$\tag{2.20} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,0} = \sum_{j=0}^{M-1} U_j^{\varepsilon,0} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)} = \sum_{j=0}^{M-1} u_0^\varepsilon(x_j) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)},\ \ell = -\frac{M}{2}, \dots, \frac{M}{2} - 1.$$

Οι προσεγγίσεις για την ακριβή λύση στους κόμβους t^n, $n = 0, 1, \dots, N$, δίνονται και πάλι από τη (2.17).

Προτού προχωρήσουμε, ορίζουμε την τριγωνομετρική παρεμβάλλουσα f_I μιας συνάρτησης $f \in C([a,b])$ στα σημεία $\{x_0, x_1, \ldots, x_{M-1}\}$ ως

$$f_I := \frac{1}{M} \sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \hat{f}_\ell \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(\cdot - a)} \quad \text{στο } [a,b], \tag{2.21}$$

με

$$\hat{f}_\ell = \sum_{j=0}^{M-1} f(x_j) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j - a)}, \ \ell = -\frac{M}{2}, \ldots, \frac{M}{2} - 1.$$

Λήμμα 2.1. *Έστω $f \in C([a,b])$. Τότε η τριγωνομετρική παρεμβάλλουσα f_I της f που δίνεται από τη (2.21) είναι μοναδική.* □

Στη συνέχεια θα αποδείξουμε ότι η Lie splitting φασματική μέθοδος και η Strang splitting φασματική μέθοδος που ορίζονται μέσω των (2.15), (2.17) και (2.18), (2.17) αντίστοιχα είναι ευσταθείς. Για το σκοπό αυτό, για $n = 0, 1, \ldots, N$, ορίζουμε τα διανύσματα

$$\mathbf{U}^{\varepsilon,n} = [U_0^{\varepsilon,n}, \ldots, U_{M-1}^{\varepsilon,n}]^{\mathrm{T}}, \tag{2.22}$$

και

$$\mathbf{u}_0^\varepsilon = \left[u_0^\varepsilon(x_0), \ldots, u_0^\varepsilon(x_{M-1})\right]^{\mathrm{T}}. \tag{2.23}$$

Είναι προφανές ότι $U^{\varepsilon,0} = u_0^\varepsilon$. Επίσης για τυχαίο διάνυσμα $\upsilon = [\upsilon_0, \ldots, \upsilon_{M-1}]^{\mathrm{T}}$, ορίζουμε τη νόρμα

$$||\upsilon||_{\ell^2} := \sqrt{\frac{b-a}{M} \sum_{j=0}^{M-1} |\upsilon_j|^2}.$$

Θα χρειαστούμε ακόμα κάποιες προφανείς ταυτότητες τις οποίες συγκεντρώνουμε στο λήμμα που ακολουθεί.

Λήμμα 2.2. *Για $\ell_1, \ell_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$ ισχύουν τα ακόλουθα*

$$\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_1}(\cdot - a)}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_2}(\cdot - a)}\right) = \begin{cases} b - a & \text{αν } \ \ell_1 = \ell_2 \\ 0 & \text{αν } \ \ell_1 \neq \ell_2, \end{cases} \tag{2.24}$$

$$\sum_{j=0}^{M-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi(\ell_1 - \ell_2)j/M} = \begin{cases} M & \text{αν } \ \ell_1 = \ell_2 \mod M \\ 0 & \text{αν } \ \ell_1 \neq \ell_2 \mod M, \end{cases} \tag{2.25}$$

$$\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi(j_1-j_2)\frac{\ell}{M}} = \begin{cases} M & \text{αν } j_1 = j_2 \mod M \\ 0 & \text{αν } j_1 \neq j_2 \mod M. \end{cases} \tag{2.26}$$

□

Πρόταση 2.1. (Ευστάθεια splitting φασματικών μεθόδων.) *Οι Lie splitting φασματική και Strang splitting φασματική μέθοδοι που ορίζονται μέσω των αριθμητικών σχημάτων* (2.15) *και* (2.18) *αντιστοίχως είναι ευσταθείς. Ειδικότερα,*

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2} = ||\mathbf{u}_0^{\varepsilon}||_{\ell^2},\ n = 0, 1, \ldots, N, \tag{2.27}$$

και

$$||U_I^{\varepsilon,n}|| = ||u_{0,I}^{\varepsilon}||,\ n = 0, 1, \ldots, N, \tag{2.28}$$

όπου τα $\mathbf{U}^{\varepsilon,n}$, $n = 01, \ldots, N$ *και* $\mathbf{u}_0^{\varepsilon}$ *ορίζονται από τις* (2.22) *και* (2.23) *αντίστοιχα, οι* $U_I^{\varepsilon,n}$, $n = 0, 1, \ldots, N$, *ορίζονται από τη* (2.17) *και η* $u_{0,I}^{\varepsilon}$ *είναι η τριγωνομετρική παρεμβάλλουσα της συνάρτησης* u_0^{ε} *στα σημεία* $\{x_0, \ldots, x_{M-1}\}$ *(βλέπε τη* (2.21)*).*

Απόδειξη. Αρχικά παρατηρούμε ότι

$$\mathbf{u}_0^{\varepsilon} = \mathbf{U}^{\varepsilon,0} \text{ και } u_{0,I}^{\varepsilon} = U_I^{\varepsilon,0}. \tag{2.29}$$

Επίσης για $n = 0, 1, \ldots, N$,

$$||U_I^{\varepsilon,n}|| = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}.$$

Πράγματι, χρησιμοποιώντας τις (2.24) και (2.26) λαμβάνουμε

$$\begin{aligned}
||U_I^{\varepsilon,n}||^2 &= ||\frac{1}{M}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \hat{U}_\ell^{\varepsilon,n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(\cdot-a)}||^2 = \frac{1}{M^2}\sum_{\ell_1,\ell_2=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \hat{U}_{\ell_1}^{\varepsilon,n}\bar{\hat{U}}_{\ell_2}^{\varepsilon,n}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_1}(\cdot-a)}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_2}(\cdot-a)}) \\
&= \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} |\hat{U}_\ell^{\varepsilon,n}|^2 = \frac{b-a}{M^2}\sum_{j_1,j_2=0}^{M-1} U_{j_1}^{\varepsilon,n}\bar{U}_{j_2}^{\varepsilon,n}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_{j_2}-x_{j_1})} \\
&= \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1} |U_j^{\varepsilon,n}|^2 = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}^2.
\end{aligned}$$

Από τα παραπάνω προκύπτει ακόμα ότι

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}^2 = \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} |\hat{U}_\ell^{\varepsilon,n}|^2. \tag{2.30}$$

Επομένως αρκεί να δείξουμε ότι ισχύει η (2.27) για τα δύο αριθμητικά σχήματα.

Χρησιμοποιώντας το αριθμητικό σχήμα (2.15) λαμβάνουμε για $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2}^2 = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,n+1}|^2 = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)\frac{k}{\varepsilon}}U_j^{\varepsilon,*}|^2$$
$$= \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,*}|^2 = \frac{b-a}{M^3}\sum_{\ell_1,\ell_2=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon k\frac{\mu_{\ell_1}^2}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon k\frac{\mu_{\ell_2}^2}{2}}\hat{U}_{\ell_1}^{\varepsilon,n}\bar{\hat{U}}_{\ell_2}^{\varepsilon,n}\sum_{j=0}^{M-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mu_{\ell_1}-\mu_{\ell_2})(x_j-a)}$$
$$= \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}|\hat{U}_\ell^{\varepsilon,n}|^2 = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}^2.$$

Η προτελευταία ισότητα ισχύει λόγω της (2.25), ενώ η τελευταία λόγω της (2.30). Άρα για $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2} = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}. \tag{2.31}$$

Ομοίως, χρησιμοποιώντας το αριθμητικό σχήμα (2.18) και τις ταυτότητες (2.25) και (2.26), λαμβάνουμε για $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2}^2 = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,n+1}|^2 = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)\frac{k}{2\varepsilon}}U_j^{\varepsilon,**}|^2$$
$$= \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,**}|^2 = \frac{b-a}{M^3}\sum_{j=0}^{M-1}|\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon k\frac{\mu_\ell^2}{2}}\hat{U}_\ell^{\varepsilon,*}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)}|^2$$
$$= \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}|\hat{U}_\ell^{\varepsilon,*}|^2 = \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}|\sum_{j=0}^{M-1}U_j^{\varepsilon,*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)}|^2$$
$$= \frac{b-a}{M^2}\sum_{j_1,j_2=1}^{M-1}U_{j_1}^{\varepsilon,*}\bar{U}_{j_2}^{\varepsilon,*}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_{j_2}-x_{j_1})} = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,*}|^2$$
$$= \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V(x_j)\frac{k}{2\varepsilon}}U_j^{\varepsilon,n}|^2 = \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|U_j^{\varepsilon,n}|^2 = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}^2$$

Άρα για $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$||\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2} = ||\mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}. \tag{2.32}$$

Λαμβάνουμε την ισότητα (2.30) χρησιμοποιώντας επαγωγή και τις σχέσεις (2.29) και (2.31) για το σχήμα (2.15) και τις σχέσεις (2.29) και (2.32) για το σχήμα (2.18).

□

Σχόλιο 2.3. Η (2.28) λέει ότι τόσο η Lie splitting φασματική μέθοδος, όσο και η Strang splitting φασματική μέθοδος ικανοποιούν το διακριτό ανάλογο της σχέσης διατήρησης (2.2)

Για την απόδειξη των εκ των προτέρων εκτιμήσεων που θα ακολουθήσουν, θα χρειαστούμε το επόμενο θεώρημα, το οποίο είναι άμεση συνέπεια του Θεωρήματος 3 στο [22].

Θεώρημα 2.2. *Έστω $C_p^\infty([a,b])$ ο χώρος των C^∞ στο $\mathbb{R}$ και $(b-a)-$περιοδικών συναρτήσεων. Έστω επίσης $m \in \mathbb{N}$ και $n \in \mathbb{N}_0$ με $n \leq m$. Τότε υπάρχει σταθερά D η οποία εξαρτάται μόνο από το $b-a$ έτσι ώστε*

$$||\frac{d^n}{dx^n}(\omega-\omega_I)|| \leq D(\frac{h}{b-a})^{m-n}||\frac{d^m}{dx^m}\omega||, \quad \forall \omega \in C_p^\infty([a,b]), \tag{2.33}$$

όπου ω_I είναι η τριγωνομετρική παρεμβάλλουσα της ω στα σημεία $\{x_0,\dots,x_{M-1}\}$.

□

Θεώρημα 2.3. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για σταθερό δυναμικό.) *Έστω u^ε η ακριβής λύση του προβλήματος* (2.1) *και έστω $V(x)=V$ για κάθε $x \in [a,b]$, δηλαδή έστω ότι το δυναμικό V είναι σταθερή συνάρτηση. Έστω επίσης $U_I^{\varepsilon,n}$, $n=0,1,\dots,N$, οι προσεγγίσεις* (2.17) *που ορίζονται μέσω των* (2.19) *και* (2.20)*. Τότε υπό την προϋπόθεση (Υ1) ισχύει, για κάθε θετικό ακέραιο m, η εκτίμηση*

$$\max_{0\leq n\leq N}||u^\varepsilon(t^n)-U_I^{\varepsilon,n}|| \leq DA_m(\frac{h}{\varepsilon(b-a)})^m, \tag{2.34}$$

όπου D η σταθερά που εμφανίζεται στη (2.33) *και A_m, $m \in \mathbb{N}$, οι σταθερές στην (Υ1).*

Απόδειξη. Για $t \in [0,T]$ και $j=0,1,\dots,M-1$, ορίζουμε τις συναρτήσεις

$$U_j^\varepsilon(t) := \frac{1}{M}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varepsilon\frac{\mu_\ell^2}{2}+\frac{V}{\varepsilon})t}\hat{U}_\ell^{\varepsilon,0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)}, \tag{2.35}$$

όπου για $\ell = -\frac{M}{2}, \ldots, \frac{M}{2} - 1$, τα $\hat{U}_\ell^{\varepsilon,0}$ ορίζονται από τη (2.20). Έστω επίσης

$$U_I^\varepsilon(x,t) = \frac{1}{M} \sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1} \Big(\sum_{j=0}^{M-1} U_j^\varepsilon(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_\ell(x_j-a)} \Big) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x-a)}, \ (x,t) \in [a,b] \times [0,T].$$

Τότε $U_I^\varepsilon(x,t^n) = U_I^{\varepsilon,n}(x)$, $x \in [a,b]$, $n = 0, 1 \ldots, N$. Παρατηρούμε ακόμα ότι η $U_I^\varepsilon : [a,b] \times [0,T] \to \mathbb{C}$ ικανοποιεί για $n = 0, 1, \ldots, N$, το πρόβλημα

$$\begin{cases} \varepsilon U_{I,t}^\varepsilon - \mathrm{i}\dfrac{\varepsilon^2}{2} U_{I,xx}^\varepsilon + \mathrm{i} V U_I^\varepsilon = 0 & \text{στο } [a,b] \times [0,t^n], \\ U_I^\varepsilon(\cdot,0) = u_{0,I}^\varepsilon & \text{στο } [a,b], \end{cases}$$

με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Έστω $e^\varepsilon := u^\varepsilon - U_I^\varepsilon$. Τότε το σφάλμα e^ε ικανοποιεί για $n = 1, \ldots, N$, το πρόβλημα

$$\begin{cases} \varepsilon e_t^\varepsilon - \mathrm{i}\dfrac{\varepsilon^2}{2} e_{xx}^\varepsilon + \mathrm{i} V e^\varepsilon = 0 & \text{στο } [a,b] \times [0,t^n], \\ e^\varepsilon(\cdot,0) = u_0^\varepsilon - u_{0,I}^\varepsilon & \text{στο } [a,b], \end{cases} \tag{2.36}$$

με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Λαμβάνοντας στην πρώτη εξίσωση του προβλήματος (2.36) το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 με την e^ε και στη συνέχεια πραγματικά μέρη παίρνουμε για $t \in [0, t^n]$ ότι

$$\frac{d}{dt} ||e^\varepsilon(t)||^2 = 0.$$

Άρα $||e^\varepsilon(t^n)|| = ||e^\varepsilon(0)||$ για $n = 0, 1, \ldots, N$. Συνεπώς για $n = 0, 1, \ldots, N$,

$$||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| = ||u_0^\varepsilon - u_{0,I}^\varepsilon|| \tag{2.37}$$

Χρησιμοποιώντας τη (2.33) συμπεραίνουμε για $m \in \mathbb{N}$ ότι

$$||u_0^\varepsilon - u_{0,I}^\varepsilon|| \leq D(\frac{h}{b-a})^m || \frac{d^m}{dx^m} u_0^\varepsilon||. \tag{2.38}$$

Συνδυάζοντας τις (2.37), (2.38) και την υπόθεση (Υ1) καταλήγουμε στην εκτίμηση (2.34). □

Παρατήρηση 2.4. Έστω $\delta > 0$ το επιθυμητό άνω φράγμα για το σφάλμα $\max_{0 \leq n \leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}||$. Τότε η $\max_{0 \leq n \leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| \leq \delta$ ισχύει αν για κάποιο $m \geq 1$,

$$\frac{h}{\varepsilon} \leq \frac{(b-a)\delta^{\frac{1}{m}}}{(DA_m)^{\frac{1}{m}}}. \tag{2.39}$$

Η (2.39) μας λέει πώς πρέπει να επιλέξουμε το χωρικό βήμα h σε σχέση με το ε ώστε να έχουμε το επιθυμητό άνω φράγμα για το σφάλμα.

Παρατήρηση 2.5. Στην περίπτωση του σταθερού δυναμικού, το πρόβλημα (2.1) επιλύεται ακριβώς ως προς το χρόνο και η διακριτοποίηση γίνεται μόνο ως προς το χώρο. Επομένως είναι απόλυτα λογικό που στην εκτίμηση (2.34) δεν εμφανίζεται χρονικό σφάλμα.

Θεώρημα 2.4. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για μεταβλητό δυναμικό.) *Έστω u^ε η ακριβής λύση του προβλήματος* (2.1) *και* $U_I^{\varepsilon,n}$, $n = 0, 1, \ldots, N$, *οι προσεγγίσεις* (2.17) *που ορίζονται από το αριθμητικό σχήμα* (2.15) *για τη Lie splitting φασματική μέθοδο. Τότε υπό τις προϋποθέσεις (Υ1)-(Υ4), ισχύει για όλους τους θετικούς ακέραιους m, η εκτίμηση*

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| \leq G_m \frac{T}{k}\Big(\frac{h}{\varepsilon(b-a)}\Big)^m + CT\frac{k}{\varepsilon}, \tag{2.40}$$

όπου η σταθερά C είναι ανεξάρτητη από τα ε, h, k και m και η G_m είναι ανεξάρτητη από τα ε, h και k.

Απόδειξη.

- **Βήμα 1°**.

Έστω $\mathcal{A}^\varepsilon$ και $\mathcal{B}^\varepsilon$ οι τελεστές που ορίζονται από τη (2.6). Για $n = 0, 1, \ldots, N-1$ και $x \in [a, b]$, έστω

$$u^{\varepsilon,n+1}(x) = \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}u(x, t^n)$$

η προσέγγιση που προκύπτει αν διακριτοποιήσουμε μόνο ως προς το χρόνο το πρόβλημα (2.1) στο διάστημα $(t^n, t^{n+1}]$ με τη μέθοδο splitting του Lie με αρχική τιμή την ακριβή λύση στον κόμβο t^n. Τότε υπό την προϋπόθεση (Υ4) για το χρονικό βήμα και τη (2.11) παίρνουμε για $n = 0, 1, \ldots, N-1$, ότι

$$||u^\varepsilon(t^{n+1}) - u^{\varepsilon,n+1}|| \leq C\frac{k^2}{\varepsilon}, \tag{2.41}$$

όπου η σταθερά C παραμένει φραγμένη καθώς τα k και ε τείνουν στο μηδέν.

Για $n = 0, 1, \ldots, N-1$, γράφουμε

$$\begin{aligned} ||u^\varepsilon(t^{n+1}) - U_I^{\varepsilon,n+1}|| \leq{}& ||u^\varepsilon(t^{n+1}) - u^{\varepsilon,n+1}|| + ||u^{\varepsilon,n+1} - u_I^{\varepsilon,n+1}|| \\ &+ ||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}||. \end{aligned} \tag{2.42}$$

• **Βήμα 2^o.**

Για $n = 0, 1, \ldots, N$, ορίζουμε

$$\mathbf{u}^{\varepsilon,n} := \big[u^{\varepsilon,n}(x_0), \ldots, u^{\varepsilon,n}(x_{M-1})\big]^{\mathrm{T}}, \tag{2.43}$$

$$\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) := \Big[\big(\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}u^\varepsilon(t^n)\big)(x_0), \ldots, \big(\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}u^\varepsilon(t^n)\big)(x_{M-1})\Big]^{\mathrm{T}}, \tag{2.44}$$

και

$$\mathbf{U}^{\varepsilon,*} := [U_1^{\varepsilon,*}, \ldots, U_{M-1}^{\varepsilon,*}]^{\mathrm{T}}. \tag{2.45}$$

Θα αποδείξουμε ότι

$$||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}|| = ||\mathbf{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*}||_{\ell^2}. \tag{2.46}$$

Πρώτα από όλα χρησιμοποιώντας τις (2.24) και (2.26) υπολογίζουμε

$$\begin{aligned}
||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}||^2 &= ||\frac{1}{M}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}(\hat{u}_\ell^{\varepsilon,n+1} - \hat{U}_\ell^{\varepsilon,n+1})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(\cdot-a)}||^2\\
&= \frac{1}{M^2}\sum_{\ell_1,\ell_2=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}(\hat{u}_{\ell_1}^{\varepsilon,n+1} - \hat{U}_{\ell_1}^{\varepsilon,n+1})(\bar{\hat{u}}_{\ell_2}^{\varepsilon,n+1} - \bar{\hat{U}}_{\ell_2}^{\varepsilon,n+1})(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_1}(\cdot-a)}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_{\ell_2}(\cdot-a)})\\
&= \frac{b-a}{M^2}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}|\hat{u}_\ell^{\varepsilon,n+1} - \hat{U}_\ell^{\varepsilon,n+1}|^2\\
&= \frac{b-a}{M^2}\sum_{j_1,j_2=0}^{M-1}(u^{\varepsilon,n+1}(x_{j_1}) - U_{j_1}^{\varepsilon,n+1})(\bar{u}^{\varepsilon,n+1}(x_{j_2}) - \bar{U}_{j_2}^{\varepsilon,n+1})\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x_{j_2}-x_{j_1})}\\
&= \frac{b-a}{M}\sum_{j=0}^{M-1}|u^{\varepsilon,n+1}(x_j) - U_j^{\varepsilon,n+1}|^2 = ||\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1} - \mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2}^2,
\end{aligned}$$

όπου το $\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}$ ορίζεται από τη (2.22) και το $\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1}$ από τη (2.43). Δηλαδή για $n = 0, 1, \ldots, N-1$,

$$||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}|| = ||\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1} - \mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2}. \tag{2.47}$$

Από την άλλη μεριά, σύμφωνα με τον ορισμό των $\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1}$ και $\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}$ μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1} = \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n)$$

και

$$\mathbf{U}^{\varepsilon,n+1} = \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^{\varepsilon}}\mathbf{U}^{\varepsilon,*}.$$

Επομένως

$$(2.48)\quad ||\mathbf{u}^{\varepsilon,n+1} - \mathbf{U}^{\varepsilon,n+1}||_{\ell^2} = ||\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^{\varepsilon}}(\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^{\varepsilon}}\mathbf{u}^{\varepsilon}(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*})||_{\ell^2} = ||\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^{\varepsilon}}\mathbf{u}^{\varepsilon}(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*}||_{\ell^2}.$$

Συνδυάζοντας τις (2.47) και (2.48) λαμβάνουμε τη (2.46).

- **Βήμα 3$^{\text{ο}}$**.

Για $x \in [a,b]$ και $t \in (t^n, t^{n+1}]$, $n = 0, 1, \ldots, N-1$, ορίζουμε

$$\omega^{\varepsilon}(x,t) := \mathrm{e}^{(t-t^n)\mathcal{A}^{\varepsilon}}u^{\varepsilon}(x,t^n),$$

και

$$U^{\varepsilon,*}(x,t) := \frac{1}{M}\sum_{\ell=-\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2}-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon(t-t^n)\frac{\mu_\ell^2}{2}}\hat{U}_{\ell}^{\varepsilon,n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_\ell(x-a)}.$$

Παρατηρούμε ότι για $j = 0, 1, \ldots, M-1$, $U^{\varepsilon,*}(x_j, t^{n+1}) = U_j^{\varepsilon,*}$. Επίσης η $\omega^{\varepsilon} : [a,b] \times (t^n, t^{n+1}] \to \mathbb{C}$ είναι εξ' ορισμού η λύση του προβλήματος

$$(2.49)\qquad \begin{cases} \omega_t^{\varepsilon} - \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}\omega_{xx}^{\varepsilon} = 0 & \text{στο } [a,b] \times (t^n, t^{n+1}], \\ \omega^{\varepsilon}(\cdot, t^n) = u^{\varepsilon}(\cdot, t^n) & \text{στο } [a,b], \end{cases}$$

με περιοδικές συνοριακές συνθήκες, ενώ εύκολα μπορούμε να δείξουμε ότι η $U^{\varepsilon,*} : [a,b] \times (t^n, t^{n+1}] \to \mathbb{C}$ ικανοποιεί το πρόβλημα

$$(2.50)\qquad \begin{cases} U_t^{\varepsilon,*} - \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}U_{xx}^{\varepsilon,*} = 0 & \text{στο } [a,b] \times (t^n, t^{n+1}], \\ \omega^{\varepsilon}(\cdot, t^n) = U_I^{\varepsilon,n} & \text{στο } [a,b], \end{cases}$$

με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Έστω $e^{\varepsilon} := \omega^{\varepsilon} - U^{\varepsilon,*}$. Τότε η $e^{\varepsilon} : [a,b] \times (t^n, t^{n+1}] \to \mathbb{C}$ ικανοποιεί το πρόβλημα

$$(2.51)\qquad \begin{cases} e_t^{\varepsilon} - \mathrm{i}\frac{\varepsilon}{2}e_{xx}^{\varepsilon} = 0 & \text{στο } [a,b] \times (t^n, t^{n+1}], \\ e^{\varepsilon}(\cdot, t^n) = u^{\varepsilon}(\cdot, t^n) - U_I^{\varepsilon,n} & \text{στο } [a,b], \end{cases}$$

με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Λαμβάνοντας στην πρώτη εξίσωση του (2.51) το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 με την e^{ε} και κατόπιν πραγματικά μέρη παίρνουμε

$$\frac{d}{dt}||e^{\varepsilon}(t)||^2 = 0 \;\text{ ή }\; ||e^{\varepsilon}(t)|| = ||e^{\varepsilon}(t^n)||,\ t \in (t^n, t^{n+1}].$$

Συνεπώς,

$$(2.52)\qquad ||\omega^\varepsilon(t^{n+1}) - U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})|| = ||\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon} u^\varepsilon(t^n) - U^{\varepsilon,*}|| = ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}||.$$

Έστω τώρα $f \in C([a,b])$, f_I η τριγωνομετρική της παρεμβάλλουσα και $\mathbf{f} = [f(x_0),\ldots,f(x_{M-1})]^{\mathrm{T}}$. Τότε από την ισότητα Parseval (η οποία μπορεί πολύ εύκολα να αποδειχθεί με χρήση των (2.24) και (2.26)), έχουμε

$$||f_I|| = ||\mathbf{f}||_{\ell^2}.$$

Επομένως (με $f = \omega^\varepsilon(t^{n+1}) - U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})$),

$$||\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*}||_{\ell^2} = ||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - \big(U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})\big)_I||.$$

Από τη μοναδικότητα της τριγωνομετρικής παρεμβάλλουσας και τον ορισμό της $U^{\varepsilon,*}(\cdot,t^{n+1})$ έπεται ότι $\big(U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})\big)_I = U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})$. Άρα

$$(2.53)\qquad \begin{aligned} ||\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*}||_{\ell^2} &= ||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})|| \\ &\le ||\omega^\varepsilon(t^{n+1}) - U^{\varepsilon,*}(t^{n+1})|| + ||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - \omega^\varepsilon(t^{n+1})||. \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας τις (2.46), (2.52) και (2.53) καταλήγουμε στην εκτίμηση

$$(2.54)\qquad ||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}|| \le ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| + ||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - \omega^\varepsilon(t^{n+1})||.$$

- **Βήμα 4^ο^**. (Εκτίμηση του $||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - \omega^\varepsilon(t^{n+1})||$.)

Χρήση της (2.33) δίνει για $m \in \mathbb{N}$, ότι

$$(2.55)\qquad ||\big(\omega^\varepsilon(t^{n+1})\big)_I - \omega^\varepsilon(t^{n+1})|| \le D(\frac{h}{b-a})^m ||\frac{d^m}{dx^m}\omega^\varepsilon(t^{n+1})||.$$

Από το πρόβλημα (2.49) συμπεραίνουμε ότι για $m \in \mathbb{N}$, η $\frac{\partial^m}{\partial x^m}\omega^\varepsilon : [a,b]\times(t^n,t^{n+1}] \to \mathbb{C}$ ικανοποιεί το πρόβλημα

$$\begin{cases} (\dfrac{\partial^m}{\partial x^m}\omega^\varepsilon)_t - \mathrm{i}\dfrac{\varepsilon}{2}(\dfrac{\partial^m}{\partial x^m}\omega^\varepsilon)_{xx} = 0 & \text{στο } [a,b]\times(t^n,t^{n+1}], \\ \dfrac{d^m}{dx^m}\omega^\varepsilon(\cdot,t^n) = \dfrac{d^m}{dx^m}u^\varepsilon(\cdot,t^n) & \text{στο } [a,b]. \end{cases}$$

Επομένως εργαζόμενοι όμοια με πριν λαμβάνουμε ότι

$$||\frac{d^m}{dx^m}\omega^\varepsilon(t^{n+1})|| = ||\frac{d^m}{dx^m}u^\varepsilon(t^n)||,$$

και άρα από την υπόθεση (Υ3),

$$||\frac{d^m}{dx^m}\omega^\varepsilon(t^{n+1})|| \leq \frac{E_m}{\varepsilon^m},\ m \in \mathbb{N}. \tag{2.56}$$

Συνδυάζοντας τις (2.42), (2.55) και (2.56) καταλήγουμε στην

$$||u_I^{\varepsilon,n+1} - U_I^{\varepsilon,n+1}|| \leq ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| + DE_m\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m. \tag{2.57}$$

- **Βήμα 5ο**. (Εκτίμηση του $||u^{\varepsilon,n+1} - u_I^{\varepsilon,n+1}||$.)

Χρησιμοποιώντας τη (2.33) παίρνουμε για $m \in \mathbb{N}$,

$$||u^{\varepsilon,n+1} - u_I^{\varepsilon,n+1}|| \leq D(\frac{h}{b-a})^m||\frac{d^m}{dx^m}u^{\varepsilon,n+1}||.$$

Θυμίζουμε ότι $u^{\varepsilon,n+1}(x) = \mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}u^\varepsilon(x,t^n)$, $x \in [a,b]$. Επομένως κάνοντας χρήση των κανόνων παραγώγισης Leibniz λαμβάνουμε

$$\frac{d^m}{dx^m}u^{\varepsilon,n+1}(x) = \sum_{j=0}^{m}\binom{m}{j}\frac{d^j}{dx^j}\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}\frac{d^{m-j}}{dx^{m-j}}\big(\mathrm{e}^{k\mathcal{A}^\varepsilon}u^\varepsilon(x,t^n)\big),\ x \in [a,b].$$

Συνεπώς

$$\begin{aligned}||\frac{d^m}{dx^m}u^{\varepsilon,n+1}|| &\leq \sum_{j=0}^{m}\binom{m}{j}||\frac{d^j}{dx^j}\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}||_{L^\infty}||\frac{d^{m-j}}{dx^{m-j}}\omega^\varepsilon(t^n)|| \\ &\leq \sum_{j=0}^{m}\binom{m}{j}||\frac{d^j}{dx^j}\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}||_{L^\infty}\frac{E_{m-j}}{\varepsilon^{m-j}}.\end{aligned}$$

Η τελευταία ανισότητα ισχύει (υπό την προϋπόθεση (Υ3)) λόγω της (2.56). Συνεπώς υπό τις προϋποθέσεις (Υ2) και (Υ4) καταλήγουμε στην

$$||\frac{d^m}{dx^m}u^{\varepsilon,n+1}|| \leq \frac{F_m}{\varepsilon^m},$$

και άρα

$$||u^{\varepsilon,n+1} - u_I^{\varepsilon,n+1}|| \leq DF_m\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m,\ m \in \mathbb{N}, \tag{2.58}$$

με τις σταθερές F_m να εξαρτώνται από το m, αλλά να παραμένουν φραγμένες καθώς τα ε, k και h τείνουν στο μηδέν.

Συνδυάζοντας τις (2.41), (2.42), (2.54) και (2.58) λαμβάνουμε για $m \in \mathbb{N}$ και $n = 0, 1, \ldots, N-1$,

$$||u^\varepsilon(t^{n+1}) - U_I^{\varepsilon,n+1}|| \leq C\frac{k^2}{\varepsilon} + D(E_m + F_m)\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m + ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}||.$$

Χρησιμοποιώντας επαγωγή και ενθυμούμενοι ότι

$$||u^\varepsilon(t^0) - U_I^{\varepsilon,0}|| = ||u_0^\varepsilon - u_{0,I}^\varepsilon|| \leq DA_m\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m,\ m \in \mathbb{N},$$

(η ανισότητα ισχύει λόγω της (Υ1)), καταλήγουμε για $m \in \mathbb{N}$, στην εκτίμηση

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| \leq G_m \frac{T}{k}\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m + CT\frac{k}{\varepsilon},$$

με $G_m = D(A_m k + E_m + F_m)$. □

Σχόλιο 2.4. Η απόδειξη του θεωρήματος που παρουσιάσαμε παραπάνω διαφέρει σε κάποιο σημείο και είναι πιο μακροσκελής από την απόδειξη στο [7]. Κι αυτό διότι θεωρούμε ότι υπάρχει κάποιο λάθος στο σημείο αυτό. Συγκεκριμένα, πιστεύουμε ότι η ισότητα

$$||\mathrm{e}^{k\mathcal{B}^\varepsilon}(\mathrm{e}^{\mathbf{k}\mathcal{A}^\varepsilon}\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,*})||_{\ell^2} = ||\mathbf{u}^\varepsilon(t^n) - \mathbf{U}^{\varepsilon,n}||_{\ell^2}$$

δεν ισχύει.

Παρατήρηση 2.6. *(Επιλογή χρονικού και χωρικού βήματος σϵ σχέση μϵ το ε.)* Έστω $\delta > 0$ το επιθυμητό άνω φράγμα για το σφάλμα, δηλαδή έστω ότι θέλουμε να ισχύει η

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| \leq \delta. \tag{2.59}$$

Τότε σύμφωνα με την εκτίμηση (2.40) για να ισχύει η (2.59) αρκεί να ακολουθήσουμε, για $m \in \mathbb{N}$, την εξής στρατηγική επιλογής χρονικού και χωρικού βήματος σε σχέση με το ε:

$$\text{(a)}\ \frac{k}{\varepsilon} = O(\frac{\delta}{T})\ \ \text{και}\ \ \text{(b)}\ \frac{h}{\varepsilon} = O\big(\frac{\delta^{1/m}}{G_m^{1/m}}(\frac{k}{T})^{1/m}(b-a)\big). \tag{2.60}$$

Σημειώνουμε ότι η εξάρτηση του χωρικού βήματος στην περίπτωση του μεταβλητού δυναμικού είναι κάπως χειρότερη σε σχέση με την περίπτωση του σταθερού δυναμικού εξαιτίας του όρου $(\frac{k}{T})^{1/m}$ που εμφανίζεται στη (2.60)(b).

Παρατήρηση 2.7. Ανάλογη με τη (2.40) εκτίμηση αναμένουμε και στην περίπτωση της Strang splitting φασματικής μεθόδου. Εφόσον η μέθοδος splitting του Strang είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας, η εκτίμηση που αναμένουμε είναι η

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^\varepsilon(t^n) - U_I^{\varepsilon,n}|| \leq G_m \frac{T}{k}\big(\frac{h}{(b-a)\varepsilon}\big)^m + CT\frac{k^2}{\varepsilon}. \tag{2.61}$$

Παρόλα αυτά οι πράξεις στην περίπτωση αυτή είναι πολύ περισσότερες και έτσι παραλείπουμε την απόδειξη της (2.61).

Παρατήρηση 2.8. *(Σύγκριση μεθόδων.)* Συγκρίνοντας τις εκτιμήσεις (2.3), (2.34), (2.40) και (2.61) βλέπουμε ότι οι splitting φασματικές μέθοδοι υπερτερούν έναντι της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων-Crank-Nicolson, ιδιαίτερα όσον αφορά την επιλογή του χρονικού βήματος σε σχέση με ε. Συγκεκριμένα, ενώ στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων-Crank-Nicolson για να έχουμε ικανοποιητικά άνω φράγματα για την L^2-νόρμα του σφάλματος, θα πρέπει να επιλέξουμε $k = o(\varepsilon^{\frac{3}{2}})$, στην περίπτωση της Lie splitting φασματικής μεθόδου αρκεί να λάβουμε $k = o(\varepsilon)$ και στη Strang splitting φασματική μέθοδο αρκεί $k = O(\varepsilon)$ για $\varepsilon \to 0^+$. Μάλιστα στην περίπτωση σταθερού δυναμικού στις splitting φασματικές μεθόδους το k μπορεί να επιλεγεί ανεξάρτητα από το ε. Το πλεονέκτημα αυτό που έχουν οι splitting φασματικές μέθοδοι σε σχέση με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων-Crank-Nicolson είναι πολύ σημαντικό διότι η εξίσωση (2.1) μας ενδιαφέρει για τιμές του ε κοντά στο μηδέν. Ειδικότερα δε μας ενδιαφέρει να προσεγγίσουμε σωστά το ασθενές όριο των παρακάτω φυσικών ποσοτήτων

$$n^\varepsilon = |u^\varepsilon|^2 \ \text{ στο } \ \bar{\Omega} \times [0, T], \tag{2.62}$$

$$J^\varepsilon = \frac{1}{2i}(\bar{u}^\varepsilon \nabla u^\varepsilon - u^\varepsilon \nabla \bar{u}^\varepsilon) \ \text{ στο } \bar{\Omega} \times [0, T]. \tag{2.63}$$

Αν $\tilde{n}^\varepsilon$ και $\tilde{J}^\varepsilon$ είναι οι προσεγγίσεις που λαμβάνουμε, όταν εφαρμόσουμε κάποιο αριθμητικό σχήμα στη (2.1), για τις n^ε και J^ε αντίστοιχα, τότε μπορεί να αποδειχθεί με χρήση του μετασχηματισμού Wigner ότι τα σφάλματα $\max_{0\le n\le N} ||n^\varepsilon(t^n) - \tilde{n}^\varepsilon(t^n)||$ και $\max_{0\le n\le N} ||J^\varepsilon(t^n) - \tilde{J}^\varepsilon(t^n)||$ μπορούν να ελεγχθούν μέσω του σφάλματος $\max_{0\le n\le N} ||u^\varepsilon(t^n) - \tilde{u}^\varepsilon(t^n)||$, όπου $\tilde{u}^\varepsilon$ είναι η προσέγγιση που λαμβάνουμε για την ακριβή λύση u^ε. Για το λόγο αυτό είναι πολύ σημαντικό να μπορούμε να επιλέγουμε σε σχέση με το ε όσο το δυνατό μεγαλύτερο χωρικό και χρονικό βήμα. Για περαιτέρω λεπτομέρειες παραπέμπουμε στο άρθρο [7], στο οποίο μάλιστα εξηγείται γιατί στην προσέγγιση των φυσικών μεγεθών (2.62) και (2.63) με τις splitting φασματικές μεθόδους αναμένονται ακόμα ασθενέστερες συνθήκες όσον αφορά στην επιλογή του χρονικού βήματος σε σχέση με το ε.

Κεφάλαιο 3

Η κυβική μη γραμμική εξίσωση Schrödinger

3.1 Το πρόβλημα

Στο τρίτο και τελευταίο κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με την κυβική μη γραμμική εξίσωση Schrödinger (κυβική NLS). Όπως και στο πρώτο κεφάλαιο, έστω $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 1$ ή 2, φραγμένο χωρίο με σύνορο $\partial\Omega$ και $0 < T < \infty$ δεδομένο. Το πρόβλημα για την κυβική NLS διατυπώνεται ως εξής: Αναζητούμε συνάρτηση $u : \bar{\Omega} \times [0,T] \to \mathbb{C}$ η οποία ικανοποιεί

$$
\begin{cases} u_t = \mathrm{i}\Delta u + \mathrm{i}\lambda|u|^2 u & \text{στο } \bar{\Omega} \times [0,T], \\ u = 0 & \text{στο } \partial\Omega \times [0,T], \\ u(\cdot,0) = u_0 & \text{στο } \bar{\Omega}, \end{cases} \tag{3.1}
$$

όπου λ είναι μια πραγματική παράμετρος και $u_0 : \bar{\Omega} \to \mathbb{C}$ δεδομένη αρχική τιμή. Είναι γνωστό ότι υπό κατάλληλες συνθήκες ομαλότητας στα αρχικά δεδομένα, το πρόβλημα (3.1) έχει μοναδική ομαλή λύση αν $d = 1$ και αν $d = 2$ με $\lambda \leq 0$ ή $\lambda > 0$ και $\lambda||u_0||^2 < 4$ ([23], [24]). Αν $d = 2$ και $\lambda > 0$ με $\lambda||u_0||^2 \geq 4$, τότε η λύση του προβλήματος μπορεί να εκρήγνυται σε πεπερασμένο χρόνο ([25], [26]). Στη συνέχεια θα υποθέσουμε ότι τα δεδομένα του προβλήματος είναι ομαλά και συμβατά, ώστε να υπάρχει μοναδική λύση του προβλήματος (3.1), αρκούντως ομαλή για τις απαιτήσεις μας.

Πρόταση 3.1. *Για το πρόβλημα (3.1) ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις διατήρησης*

$$\max_{0\le t\le T}||u(t)|| = ||u_0||, \tag{3.2}$$

$$||\nabla u(t)||^2 - \frac{\lambda}{2}|u(t)|_4^4 = ||\nabla u_0|| - \frac{\lambda}{2}|u_0|_4^4, \quad t\in[0,T]. \tag{3.3}$$

Απόδειξη. Η σχέση διατήρησης (3.2) αποδεικνύεται όπως και στη γραμμική περίπτωση: Λαμβάνουμε στην πρώτη εξίσωση της (3.1) το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 με τη u και κατόπιν πραγματικά μέρη οπότε προκύπτει η

$$\frac{d}{dt}||u(t)||^2 = 0,\ t\in[0,T],$$

από την οποία έπεται αμέσως η (3.2).

Για την απόδειξη της (3.3) λαμβάνουμε στην πρώτη εξίσωση της (3.1) το εσωτερικό γινόμενο στον L^2 με τη u_t και μετά φανταστικά μέρη. Τότε

$$\mathrm{Re}\int_0^t \big(\nabla u(\tau),\nabla u_t(\tau)\big)\,d\tau = \lambda\mathrm{Re}\int_0^t \big(|u(\tau)|^2u(\tau),u_t(\tau)\big)\,d\tau. \tag{3.4}$$

Όμως

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\int_0^t \big(\nabla u(\tau),\nabla u_t(\tau)\big)\,d\tau &= \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_0^t ||\nabla u(\tau)||^2\,d\tau\\ &= \frac{1}{2}||\nabla u(t)||^2 - \frac{1}{2}||\nabla u(0)||^2.\end{aligned} \tag{3.5}$$

Από την άλλη μεριά

$$\begin{aligned}&\mathrm{Re}\int_0^t \big(|u(\tau)|^2u(\tau),u_t(\tau)\big)\,d\tau = \mathrm{Re}\int_0^t\int_\Omega |u(x,\tau)|^2u(x,\tau)\bar{u}_t(x,\tau)\,dx\,d\tau\\ &= \int_0^t\int_\Omega |u(x,\tau)|^2\mathrm{Re}\big(u(x,\tau)\bar{u}_t(x,\tau)\big)\,dx\,d\tau = \frac{1}{2}\int_\Omega\int_0^t |u(x,\tau)|^2\frac{d}{d\tau}|u(x,\tau)|^2\,d\tau\,dx\\ &= \frac{1}{4}|u(t)|_4^4 - \frac{1}{4}|u(0)|_4^4 - \mathrm{Re}\int_0^t \big(|u(\tau)|^2u(\tau),u_t(\tau)\big)\,d\tau.\end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$\mathrm{Re}\int_0^t \big(|u(\tau)|^2u(\tau),u_t(\tau)\big)\,d\tau = \frac{1}{4}|u(t)|_4^4 - \frac{1}{4}|u(0)|_4^4. \tag{3.6}$$

Συνδυάζοντας τις (3.4), (3.5) και (3.6) λαμβάνουμε την (3.3). □

Όπως και στο πρώτο κεφάλαιο, έτσι και εδώ, θα θεωρήσουμε το ημιδιακριτό και πλήρως διακριτό σχήμα για το πρόβλημα (3.1) με διακριτοποίηση ως προς το χώρο τα πεπερασμένα στοιχεία και ως προς το χρόνο τη μέθοδο Crank-Nicolson. Θα αποδείξουμε και πάλι την καλή ορισιμότητα των προσεγγίσεων, την ευστάθεια των αριθμητικών σχημάτων στην L^2-νόρμα και εκ των προτέρων εκτιμήσεις. Τα αποτελέσματα της ενότητας αυτής είναι παρμένα από το άρθρο [12]. Στο συγκεκριμένο άρθρο μελετάται και ένα άλλο αριθμητικό σχήμα στο οποίο η διακριτοποίηση ως προς το χρόνο γίνεται με μια τροποποιημένη μέθοδο Crank-Nicolson. Αυτό το αριθμητικό σχήμα προτάθηκε στο [27] και το πλεονέκτημά του σε σχέση με το σχήμα στο οποίο η διακριτοποίηση ως προς το χρόνο γίνεται με τη μέθοδο Crank-Nicolson είναι ότι ικανοποιεί, εκτός από το διακριτό ανάλογο της σχέσης διατήρησης (3.2), και το διακριτό ανάλογο της σχέσης διατήρησης (3.3).

Έστω λοιπόν ο χώρος πεπερασμένων στοιχείων τον οποίο εισαγάγαμε στο πρώτο κεφάλαιο. Θα υποθέσουμε επιπλέον ότι τα στοιχεία του S_h ικανοποιούν την αντίστροφη ανισότητα

$$||\varphi||_{L^\infty} \le C_I h^{-\frac{d}{2}}||\varphi||, \ \forall \varphi \in S_h, \tag{3.7}$$

και επίσης ότι ισχύει η

$$\lim_{h\to 0} \sup_{0\le t\le T} \inf_{\varphi\in S_h} \{||u(t)-\varphi||_{L^\infty} + h^{-\frac{d}{2}}||u(t)-\varphi||\} = 0. \tag{3.8}$$

Εξαιτίας της εμφάνισης του μη γραμμικού όρου στην πρώτη εξίσωση του προβλήματος (3.1), η απόδειξη των αποτελεσμάτων δεν είναι τόσο απλή, όπως στο πρώτο κεφάλαιο. Για να μπορέσουμε να αποδείξουμε εκ των προτέρων εκτιμήσεις για το πρόβλημα (3.1), θα χρειαστεί να χρησιμοποιήσουμε τις εκτιμήσεις για το πρόβλημα

$$\begin{cases} v_t = \mathrm{i}\Delta v + \mathrm{i}f(v) & \text{στο } \bar\Omega \times [0,T], \\ v = 0 & \text{στο } \partial\Omega \times [0,T], \\ v(\cdot,0) = u_0 & \text{στο } \bar\Omega, \end{cases} \tag{3.9}$$

όπου η $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ είναι μια κατάλληλη Lipschitz συνεχής συνάρτηση. Ως εκ τούτου θα αποδείξουμε πρώτα εκτιμήσεις για το πρόβλημα (3.9) και στη συνέχεια για το πρόβλημα (3.1).

Προτού προχωρήσουμε στα αριθμητικά σχήματα, σημειώνουμε ότι το πρόβλημα

(3.1) γράφεται ισοδύναμα σε μεταβολική μορφή ως

$$(3.10)\quad \begin{cases} \big(u_t(t), w\big) + \mathrm{i}\big(\nabla u(t), \nabla w\big) = \mathrm{i}\lambda\big(|u(t)|^2 u(t), w\big), & \forall w \in H_0^1,\ 0 \le t \le T, \\ u(\cdot, 0) = u_0, \end{cases}$$

και αντίστοιχα, το πρόβλημα (3.9), ως

$$(3.11)\quad \begin{cases} \big(v_t(t), w\big) + \mathrm{i}\big(\nabla v(t), \nabla w\big) = \mathrm{i}\big(f(v), w\big), & \forall w \in H_0^1,\ 0 \le t \le T, \\ v(\cdot, 0) = u_0. \end{cases}$$

3.2 Η περίπτωση της Lipschitz συνεχούς συνάρτησης

Έστω ότι η συνάρτηση $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ που εμφανίζεται στο πρόβλημα (3.9) είναι Lipschitz συνεχής. Επομένως υπάρχει σταθερά $L > 0$ τέτοια ώστε

$$(3.12)\quad |f(z_1) - f(z_2)| \le L|z_1 - z_2|, \quad \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}.$$

Υποθέτουμε επίσης ότι υπάρχει σταθερά $c_1 > 0$ τέτοια ώστε

$$(3.13)\quad |f(z)| \le c_1|z|, \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

3.2.1 Ημιδιακριτοποίηση

Ορίζουμε την ημιδιακριτή προσέγγιση της ακριβούς λύσης v του προβλήματος (3.9) στον S_h ως την απεικόνιση $v_h : [0, T] \to S_h$ που ικανοποιεί το πρόβλημα

$$(3.14)\quad \begin{cases} \big(v_{h,t}(t), \varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla v_h(t), \nabla \varphi\big) = \mathrm{i}\big(f(v_h), \varphi\big), & \forall \varphi \in S_h,\ 0 \le t \le T, \\ v_h(\cdot, 0) = u_h^0, \end{cases}$$

όπου η $u_h^0 \in S_h$ ικανοποιεί την (1.5).

Το πρόβλημα (3.14), όπως και στη γραμμική περίπτωση, αντιστοιχεί σε ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων (Σ.Δ.Ε.) (όχι όμως γραμμικών διαφορικών εξισώσεων). Εφόσον η f είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση, από τη θεωρία των Σ.Δ.Ε. έπεται ότι το πρόβλημα (3.14) έχει μοναδική λύση.

Θεώρημα 3.1. *Έστω v_h η προσέγγιση που ορίζεται μέσω του (3.14) και v η ακριβής λύση του προβλήματος (3.9). Τότε αν η v είναι αρκούντως ομαλή, ισχύει η εκτίμηση*

$$(3.15)\quad \max_{0 \le t \le T} ||v(t) - v_h(t)|| \le C(v)(||u_0 - u_h^0|| + h^r),$$

όπου η σταθερά $C(v)$ εξαρτάται από την ακριβή λύση v, όχι όμως από το h. Επομένως, λόγω της (1.5),

$$\max_{0\le t\le T} ||v(t) - v_h(t)|| \le C(v)h^r. \tag{3.16}$$

Απόδειξη. Έστω

$$\rho := v - R_h v \ \text{ και } \ \theta := R_h v - v_h,$$

όπου $R_h v$ είναι η ελλειπτική προβολή της v που ορίζεται στην (1.10). Χρησιμοποιώντας τις (1.11), (3.11) και (3.14) λαμβάνουμε ότι

$$\big(\theta(t), \varphi\big) + \mathrm{i}(\nabla\theta(t), \nabla\varphi) = -\big(\rho_t(t), \varphi\big) + \mathrm{i}\big(f\big(v(t)\big) - f\big(v_h(t)\big), \varphi\big),\ \forall \varphi \in S_h, 0 \le t \le T.$$

Θέτοντας εδώ $\varphi = \theta$ και παίρνοντας στη συνέχεια πραγματικά μέρη λαμβάνουμε ότι

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}||\theta(t)||^2 \le (||f\big(v(t)\big) - f\big(v_h(t)\big)|| + ||\rho_t(t)||)||\theta(t)||,$$

ή

$$||\theta(t)|| \le ||f\big(v(t)\big) - f\big(v_h(t)\big)|| + ||\rho_t(t)||,\ 0 \le t \le T.$$

Όμως η f είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση και άρα από την (3.12),

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}||\theta(t)|| &\le L||(v - v_h)(t)|| + ||\rho_t(t)|| \\ &\le L||\theta(t)|| + L||\rho(t)|| + ||\rho_t(t)||,\ t \in [0, T].\end{aligned}$$

Επομένως χρήση της ανισότητας Gronwall δίνει ότι

$$||\theta(t)|| \le \mathrm{e}^{LT}(||\theta(0)|| + L\int_0^T ||\rho(t)||\,dt + \int_0^T ||\rho_t(t)||\,dt),\ t \in [0, T].$$

Από την (1.11) και τη μοναδικότητα της ελλειπτικής προβολής έχουμε ότι

$$||\rho(t)|| \le C(v)h^r,\ 0 \le t \le T,$$

και

$$||\rho_t(t)|| \le C(v)h^r,\ 0 \le t \le T.$$

Επίσης,

$$||\theta(0)|| \le ||\rho(0)|| + ||u_0 - u_h^0|| \le C(v)h^r + ||u_0 - u_h^0||.$$

Συνδυάζοντας τις τέσσερις τελευταίες σχέσεις λαμβάνουμε την εκτίμηση (3.15). □

3.2.2 Το πλήρως διακριτό σχήμα

Θα χρησιμοποιήσουμε και πάλι τους συμβολισμούς (1.21) και (1.22) για τη διακριτοποίηση του ημιδιακριτού προβλήματος (3.14) ως προς το χρόνο με τη μέθοδο Crank-Nicolson. Οι προσεγγίσεις $V^n \in S_h$ των $v^n := v(\cdot, t^n)$, $n = 0, 1, \ldots, N$, ορίζονται ως

$$
\begin{cases} (\partial V^n, \varphi) + \mathrm{i}(\nabla V^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \varphi) = \mathrm{i}\big(f(V^{n+\frac{1}{2}}), \varphi\big), & \forall \varphi \in S_h,\ 0 \le n \le N-1, \\ V^0 = u_h^0, & \end{cases} \tag{3.17}
$$

Για να αποδείξουμε την ύπαρξη των προσεγγίσεων V^n, $n = 0, 1, \ldots, N$, θα χρησιμοποιήσουμε την ακόλουθη μορφή του θεωρήματος σταθερού σημείου του Brower.

Λήμμα 3.1. *Έστω $\big(H, (\cdot, \cdot)\big)$ ένας πεπερασμενοδιάστατος γραμμικός χώρος εσωτερικού γινομένου και έστω $||\cdot||$ η επαγόμενη από αυτόν νόρμα. Έστω $G : H \to H$ συνεχής συνάρτηση και υποθέτουμε ότι υπάρχει $\alpha > 0$ έτσι ώστε για κάθε $z \in H$ με $||z|| = \alpha$ να ισχύει ότι $\mathrm{Re}\big(G(z), z\big) \ge 0$. Τότε υπάρχει $z^* \in H$ τέτοιο ώστε $G(z^*) = 0$ και $||z^*|| \le \alpha$.*

Απόδειξη. Υποθέτουμε ότι για κάθε $z \in H$ με $||z|| \le \alpha$ ισχύει $G(z) \ne 0$ και έστω $B = \{z \in H : ||z|| \le \alpha\}$. Ορίζουμε τη συνάρτηση $\mathrm{r} : B \to B$ με

$$
\mathrm{r}(z) = -\alpha \frac{G(z)}{||G(z)||}.
$$

Λόγω της υπόθεσης, η r είναι συνεχής. Επομένως από το θεώρημα σταθερού σημείου του Brower ([28, σελ. 441], Θεώρημα 3), υπάρχει $z_0 \in B$ τέτοιο ώστε $\mathrm{r}(z_0) = z_0$. Όμως τότε

$$
||z_0|| = ||\mathrm{r}(z_0)|| = \alpha > 0, \tag{3.18}
$$

και

$$
\begin{aligned} ||z_0||^2 = \big(\mathrm{r}(z_0), z_0\big) &= -\frac{\alpha}{||G(z_0)||}\big(G(z_0), z_0\big) \\ &= -\frac{\alpha}{||G(z_0)||}\mathrm{Re}\big(G(z_0), z_0\big) \le 0 \end{aligned} \tag{3.19}
$$

(διότι $\mathrm{Re}\big(G(z_0), z_0\big) \ge 0$). Από τις (3.18) και (3.19) καταλήγουμε σε άτοπο. □

Στη συνέχεια ορίζουμε τη συνάρτηση $\Phi : S_h \to S_h$ έτσι ώστε

$$(\Phi(\varphi),\chi) = \frac{1}{2}\big[-(\nabla\varphi,\nabla\chi) + \big(f(\varphi),\chi\big)\big],\ \forall\varphi,\chi\in S_h. \tag{3.20}$$

Τότε η Φ είναι συνεχής. Πράγματι από τον ορισμό της,

$$\begin{aligned}&||\Phi(\varphi_1)-\Phi(\varphi_2)||^2 = \big(\Phi(\varphi_1)-\Phi(\varphi_2),\Phi(\varphi_1)-\Phi(\varphi_2)\big)\\ &= \frac{1}{2}[||\nabla(\varphi_1-\varphi_2)||^2 - 2\mathrm{Re}\big(\nabla(\varphi_1-\varphi_2), f(\varphi_1)-f(\varphi_2)\big)\\ &+ ||f(\varphi_1)-f(\varphi_2)||^2] \le \frac{1}{2}(||\nabla\varphi_1-\nabla\varphi_2|| - ||f(\varphi_1)-f(\varphi_2)||)^2.\end{aligned} \tag{3.21}$$

Η τελευταία ανισότητα ισχύει λόγω της ανισότητας Cauchy-Schwarz. Από την (3.21) προκύπτει η συνέχεια της Φ, διότι η f είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση και ο S_h είναι πεπερασμένης διάστασης υπόχωρος του H_0^1 (και άρα όλες οι νόρμες του είναι ισοδύναμες).

Πρόταση 3.2. (Καλή ορισιμότητα των V^n.) *Αν $k < 2\max\{\frac{1}{c_1},\frac{1}{L}\}$, όπου k είναι το χρονικό βήμα, c_1 η σταθερά που εμφανίζεται στην* (3.13) *και L η σταθερά Lipschitz για την f, τότε για $n = 0,1,\dots,N$, υπάρχουν μοναδικά V^n που ικανοποιούν το πρόβλημα* (3.17).

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της Φ (βλέπε την (3.20)) μπορούμε να γράψουμε ισοδύναμα το πρόβλημα (3.17) ως

$$\begin{cases} V^{n+\frac{1}{2}} = V^n + \mathrm{i}k\Phi(V^{n+\frac{1}{2}}),\ 0\le n\le N-1,\\ V^0 = u_h^0.\end{cases} \tag{3.22}$$

Για $n=0$, το $V^0 = u_h^0$ είναι καλά ορισμένο. Δεδομένου V^n ορίζουμε την απεικόνιση $\Pi : S_h \to S_h$ με

$$\Pi(\varphi) := \varphi - V^n - \mathrm{i}k\Phi(\varphi),\ \varphi\in S_h.$$

Τότε η Π είναι συνεχής, διότι η Φ είναι συνεχής. Επίσης,

$$\big(\Pi(\varphi),\varphi\big) = ||\varphi||^2 - (V^n,\varphi) - \mathrm{i}k\big(\Phi(\varphi),\varphi\big).$$

Συνεπώς, λαμβάνοντας πραγματικά μέρη, έχουμε ότι

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\big(\Pi(\varphi),\varphi\big) &= ||\varphi||^2 - \mathrm{Re}(V^n,\varphi) + \frac{k}{2}\mathrm{Im}\big(f(\varphi),\varphi\big)\\ &\ge ||\varphi||^2 - ||V^n||\,||\varphi|| - \frac{k}{2}||f(\varphi)||\,||\varphi||.\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την (3.13) παίρνουμε ότι

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}\big(\Pi(\varphi),\varphi\big) &\geq ||\varphi||^2 - ||V^n||\,||\varphi|| - \frac{c_1 k}{2}||\varphi||^2 \\ &= ||\varphi||\big((1-\frac{c_1 k}{2})||\varphi|| - ||V^n||\big).\end{aligned} \tag{3.23}$$

Άρα για κάθε $\varphi \in S_h$ με $||\varphi|| = \frac{2}{2-c_1 k}||V^n|| + 1 > 0$ λαμβάνουμε ότι $\operatorname{Re}\big(\Pi(\varphi),\varphi\big) \geq 0$. Συνεπώς χρησιμοποιώντας το Λήμμα 3.1, συμπεραίνουμε ότι υπάρχει $\varphi^* \in S_h$ τέτοιο, ώστε $\Pi(\varphi^*) = 0$, δηλαδή υπάρχει V^{n+1} που ικανοποιεί την (3.17).

Για τη μοναδικότητα εργαζόμαστε ως εξής: Δεδομένου $V^n \in S_h$, έστω V, $W \in S_h$ που ικανοποιούν την πρώτη εξίσωση του προβλήματος (3.22), δηλαδή έστω

$$V = V^n + \mathrm{i}k\Phi(V) \quad \text{και} \quad W = V^n + \mathrm{i}k\Phi(W).$$

Τότε

$$(V-W,\varphi) = \mathrm{i}\frac{k}{2}\big[-\big(\nabla(V-W),\nabla\varphi\big) + \big(f(V)-f(W),\varphi\big)\big].$$

Επομένως για $\varphi = V - W$ παίρνουμε ότι

$$||V-W||^2 = -\mathrm{i}\frac{k}{2}||\nabla(V-W)||^2 + \mathrm{i}\frac{k}{2}\big(f(V)-f(W),V-W\big).$$

Λαμβάνοντας εδώ πραγματικά μέρη καταλήγουμε στη σχέση

$$||V-W||^2 = -\frac{k}{2}\operatorname{Im}\big(f(V)-f(W),V-W\big) \leq \frac{Lk}{2}||V-W||^2. \tag{3.24}$$

Η τελευταία ανισότητα προκύπτει από την ανισότητα Cauchy-Schwarz και την (3.12). Εφόσον $k < \frac{2}{L}$, από την (3.24) έπεται ότι $||V-W||^2 \leq 0$ και άρα $V = W$. □

Θεώρημα 3.2. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για τη Lipschitz συνεχή περίπτωση.) *Για $n = 0, 1, \ldots, N$, έστω V^n οι προσεγγίσεις που ορίζονται μέσω του αριθμητικού σχήματος (3.17) και έστω $v^n := v(\cdot, t^n)$ οι τιμές της ακριβούς λύσης του προβλήματος (3.9). Τότε, αν η ακριβής λύση v είναι αρκούντως ομαλή και αν επιλέξουμε το χρονικό βήμα k έτσι ώστε $k < \frac{2}{L}$, ισχύει η ακόλουθη εκ των προτέρων εκτίμηση*

$$\max_{0\leq n\leq N} ||v^n - V^n|| \leq C(v)(||u_0 - u_h^0|| + h^r + k^2), \tag{3.25}$$

και επομένως λόγω της (1.5)

$$\max_{0\leq n\leq N} ||v^n - V^n|| \leq C(v)(h^r + k^2). \tag{3.26}$$

Απόδειξη. Για $n = 0, 1, \ldots, N$, έστω

$$\theta^n := V^n - R_h v^n \quad \text{και} \quad \rho^n := R_h v^n - v^n.$$

Τότε από την (1.11) προκύπτει άμεσα ότι

$$\max_{0 \le n \le N} ||\rho^n|| \le C(v) h^r. \tag{3.27}$$

Επομένως απομένει να εκτιμήσουμε την ποσότητα $\max_{0 \le n \le N} ||\theta^n||$. Χρησιμοποιώντας τις (1.10), (3.17) και (3.11) λαμβάνουμε ότι

$$(\partial \theta^n, \varphi) + \mathrm{i}(\nabla \theta^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \varphi) = -(E^n, \varphi), \ \forall \varphi \in S_h, n = 0, 1, \ldots, N-1, \tag{3.28}$$

όπου για $n = 0, 1, \ldots, N-1$,

$$E^n := E_1^n + E_2^n + E_3^n + E_4^n,$$

με

$$E_1^n = \partial R_h v^n - \partial v^n,$$
$$E_2^n = \partial v^n - v_t(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}}),$$
$$E_3^n = \mathrm{i}\big(\varDelta v(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}}) - \varDelta v^{n+\frac{1}{2}}\big)$$

και

$$E_4^n = \mathrm{i}\big[f\big(v(\cdot, t^{n+\frac{1}{2}})\big) - f(V^{n+\frac{1}{2}})\big].$$

Κάνοντας χρήση στις (1.37)-(1.40) (αντικαθιστώντας όπου u τη v) έχουμε ότι

$$\max_{0 \le n \le N-1} ||E_1^n|| \le C(v) h^r, \tag{3.29}$$

$$\max_{0 \le n \le N-1} ||E_2^n|| \le C(v) k^2 \tag{3.30}$$

και

$$\max_{0 \le n \le N-1} ||E_3^n|| \le C(v) k^2. \tag{3.31}$$

Επίσης εργαζόμενοι, όπως στην περίπτωση των εκτιμήσεων των (1.35) και (1.36), λαμβάνουμε κατ' αναλογία προς τις (1.41) και (1.42) ότι

$$\max_{0 \le n \le N-1} ||v^{n+\frac{1}{2}} - R_h v^{n+\frac{1}{2}}|| \le C(v) h^r$$

και
$$\max_{0\le n\le N-1} ||v(t^{n+\frac{1}{2}}) - v^{n+\frac{1}{2}}|| \le C(v)k^2.$$
Χρησιμοποιώντας τις δύο παραπάνω εκτιμήσεις και το γεγονός ότι η f είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση λαμβάνουμε για $n = 0, 1, \ldots, N-1$, την εκτίμηση

$$\begin{aligned} ||E_4^n|| &= ||f\big(v(t^{n+\frac{1}{2}})\big) - f(V^{n+\frac{1}{2}})|| \le L||v(t^{n+\frac{1}{2}}) - V^{n+\frac{1}{2}}|| \\ &\le L(||v(t^{n+\frac{1}{2}}) - v^{n+\frac{1}{2}}|| + ||v^{n+\frac{1}{2}} - R_h v^{n+\frac{1}{2}}|| + ||\theta^{n+\frac{1}{2}}||) \\ &\le \frac{L}{2}(||\theta^{n+1}|| + ||\theta^n||) + C(v)(h^r + k^2). \end{aligned} \tag{3.32}$$

Θέτοντας τώρα στην (3.28) $\varphi = \theta^{n+\frac{1}{2}}$ και λαμβάνοντας στη συνέχεια πραγματικά μέρη παίρνουμε ότι
$$||\theta^{n+1}||^2 - ||\theta^n||^2 = -k\mathrm{Re}(E^n, \theta^{n+1} + \theta^n)$$
ή λόγω της ανισότητας Cauchy-Schwarz,
$$||\theta^{n+1}|| \le ||\theta^n|| + k||E^n||,\ n = 0, 1, \ldots, N-1.$$
Χρησιμοποιώντας εδώ τις εκτιμήσεις (3.29)-(3.32) καταλήγουμε στην
$$||\theta^{n+1}|| \le ||\theta^n|| + \frac{Lk}{2}(||\theta^{n+1}|| + ||\theta^n||) + kC(v)(h^r + k^2),\ n = 0, 1, \ldots, N-1.$$
Εφόσον $k < \frac{2}{L}$,
$$||\theta^{n+1}|| \le \frac{1 + \frac{Lk}{2}}{1 - \frac{Lk}{2}}||\theta^n|| + \frac{k}{1 - \frac{Lk}{2}}C(v)(h^r + k^2),\ n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{3.33}$$
Η (3.33) είναι της ίδιας μορφής με την (1.47). Έτσι εργαζόμενοι όπως το τελευταίο μέρος της απόδειξης του Θεωρήματος 1.2 λαμβάνουμε την εκτίμηση
$$\max_{0\le n\le N} ||\theta^n|| \le C||\theta^0|| + C(v)(h^r + k^2). \tag{3.34}$$
Η ζητούμενη εκτίμηση (3.25) προκύπτει από τις (3.27) και (3.34) και τη σχέση $\max_{0\le n\le N} ||v^n - V^n|| \le \max_{0\le n\le N} ||\rho^n|| + \max_{0\le n\le N} ||\theta^n||$. □

3.3 Αριθμητική επίλυση της κυβικής NLS

Όπως προαναφέραμε, για την απόδειξη εκ των προτέρων εκτιμήσεων για το πρόβλημα (3.1), θα χρησιμοποιήσουμε τις εκ των προτέρων εκτιμήσεις της προηγούμενης ενότητας, δηλαδή θα χρησιμοποιήσουμε τα αποτελέσματα των Θεωρημάτων 3.1 και 3.2. Για να καταστεί πιο σαφές το τι εννοούμε, παραθέτουμε τα ακόλουθα βοηθητικά αποτελέσματα, τα οποία θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια για την απόδειξη εκ των προτέρων εκτιμήσεων για την κυβική NLS.

Λήμμα 3.2. ([13], [14]) *Έστω $M > 0$. Τότε υπάρχει συνάρτηση $\tilde{f} : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ τέτοια, ώστε:*

(1) $\tilde{f}(z) = |z|^2 z$ αν $|z| \leq M$.

(2) Υπάρχει σταθερά $\tilde{c}_1 > 0$ τέτοια, ώστε $|\tilde{f}(z)| \leq \tilde{c}_1 |z|$, $\forall z \in \mathbb{C}$.

(3) Η $\tilde{f}$ είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση, δηλαδή υπάρχει σταθερά $\tilde{L} > 0$ έτσι, ώστε

$$|\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| \leq \tilde{L}|z_1 - z_2|, \ \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}.$$

Απόδειξη. Έστω $\gamma : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ μια C^2 συνάρτηση με φραγμένες παραγώγους τέτοια, ώστε

$$\gamma(s) = \begin{cases} s & \text{αν } \ s \leq M^2 \\ (2M)^2 & \text{αν } \ s \geq (2M)^2 \end{cases}$$

και

$$M^2 \leq \gamma(s) \leq (2M)^2 \ \text{ αν } \ M^2 \leq s \leq (2M)^2.$$

Ορίζουμε τη συνάρτηση $\tilde{f} : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ με

$$\tilde{f}(z) = \gamma(|z|^2) z.$$

Τότε προφανώς ισχύουν οι (1) και (2) με $\tilde{c}_1 = (2M)^2$.

Για την απόδειξη της (3), γράφουμε πρώτα

$$\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2) = \gamma(|z_1|^2)(z_1 - z_2) + \big[\gamma(|z_1|^2) - \gamma(|z_2|^2)\big] z_2.$$

Από το Θεώρημα Μέσης Τιμής έπεται ότι υπάρχει κάποιο ξ ανάμεσα στα $|z_1|^2$ και $|z_2|^2$ τέτοιο, ώστε

$$\gamma(|z_1|^2) - \gamma(|z_2|^2) = \gamma'(\xi)(|z_1| - |z_2|)(|z_1| + |z_2|).$$

- 1^{η} περίπτωση: Έστω $|z_1|, |z_2| \geq 4M$.

Τότε $\xi \geq (4M)^2$ και άρα $\gamma'(\xi) = 0$. Επομένως $\gamma(|z_1|^2) - \gamma(|z_2|^2) = 0$, δηλαδή

$$|\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| = |\gamma(|z_1|^2)||z_1 - z_2| \leq (2M)^2 |z_1 - z_2|. \tag{3.35}$$

- 2^{η} περίπτωση: Έστω $|z_1|, |z_2| \leq 4M$.

Τότε

$$|\gamma(|z_1|^2) - \gamma(|z_2|^2)|\,|z_2| \leq 32M^2 \sup_{s\in[0,\infty)} |\gamma'(s)|\,|z_1 - z_2|.$$

Επομένως

$$|\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| \leq (2M)^2\big[1 + 8 \sup_{s\in[0,\infty)} |\gamma'(s)|\big]|z_1 - z_2|. \tag{3.36}$$

- 3^{η} περίπτωση: Έστω $|z_1| \geq 4M$ και $|z_2| \leq 4M$.

$\rightsquigarrow$ Αν $|z_1| \geq 4M$ και $2M \leq |z_2| \leq 4M$, τότε $\xi \geq (2M)^2$ και άρα $\gamma'(\xi) = 0$. Συνεπώς

$$|\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| \leq (2M)^2|z_1 - z_2|. \tag{3.37}$$

$\rightsquigarrow$ Αν $|z_1| \geq 4M$ και $z_2 \leq 2M$, τότε $|z_1 - z_2| \geq |z_1| - |z_2| \geq 2M$ και επομένως $|z_1 - z_2| \geq |z_2|$. Άρα

$$\begin{aligned} |\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| &\leq |\gamma(|z_1|^2)|\,|z_1 - z_2| + \big[|\gamma(|z_1|^2)| + |\gamma(|z_2|^2)|\big]|z_2| \\ &\leq (2M)^2|z_1 - z_2| + 2(2M)^2|z_1 - z_2| \leq 3(2M)^2|z_1 - z_2|. \end{aligned} \tag{3.38}$$

- 4^{η} περίπτωση: Έστω $|z_1| \leq 4M$ και $|z_2| \geq 4M$.

Τότε $|\tilde{f}(z_1) - \tilde{f}(z_2)| = |\tilde{f}(z_2) - \tilde{f}(z_1)|$, και άρα η 4^{η} περίπτωση είναι η ίδια με την 3^{η} περίπτωση.

Συνδυάζοντας τις τέσσερις παραπάνω περιπτώσεις και χρησιμοποιώντας τις (3.35)-(3.38) λαμβάνουμε την (3) με

$$\tilde{L} = \max\{(2M)^2(1 + 8 \sup_{s\in[0,\infty)} |\gamma'(s)|), 3(2M)^2\}.$$

$\square$

Πόρισμα 3.1. *Έστω $\lambda \in \mathbb{R}$ και $M > 0$. Τότε υπάρχει συνάρτηση $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ τέτοια, ώστε:*

(1) $f(z) = \lambda|z|^2 z$ αν $|z| \leq M$.

(2) Υπάρχει σταθερά $c_1 > 0$ τέτοια, ώστε $|f(z)| \leq c_1|z|$, $\forall z \in \mathbb{C}$.

(3) Η f είναι Lipschitz συνεχής συνάρτηση, δηλαδή υπάρχει σταθερά $L > 0$ έτσι, ώστε

$$|f(z_1) - f(z_2)| \leq L|z_1 - z_2|, \ \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}.$$

$\square$

3.3.1 Ημιδιακριτοποίηση

Η ημιδιακριτή προσέγγιση u_h στον S_h της ακριβούς λύσης u του προβλήματος (3.1) ορίζεται ως η απεικόνιση $u_h : [0,T] \to S_h$ που ικανοποιεί το πρόβλημα

$$\begin{cases} \big(u_{h,t}(t),\varphi\big) + \mathrm{i}\big(\nabla u_h(t),\nabla\varphi\big) = \mathrm{i}\lambda\big(|u_h(t)|^2 u_h(t),\varphi\big), \ \forall\varphi\in S_h,\ 0\le t\le T, \\ u_h(\cdot,0) = u_h^0, \end{cases} \tag{3.39}$$

Εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη της Πρότασης 3.1 μπορούμε να αποδείξουμε ότι η ημιδιακριτή προσέγγιση u_h ικανοποιεί τις σχέσεις διατήρησης

$$\max_{0\le t\le T} ||u_h(t)|| = ||u_h^0||, \tag{3.40}$$

$$||\nabla u_h(t)|| - \frac{\lambda}{2}|u_h(t)|_4^4 = ||\nabla u_h^0|| - \frac{\lambda}{2}|u_h^0|_4^4, \quad t\in[0,T], \tag{3.41}$$

οι οποίες είναι τα ημιδιακριτά ανάλογα των σχέσεων διατήρησης (3.2) και (3.3). Από την (3.40) έπεται και η ευστάθεια του ημιδιακριτού σχήματος.

Πρόταση 3.3. (Καλή ορισιμότητα ημιδιακριτής προσέγγισης.) *Υπάρχει μοναδική λύση* $u_h : [0,T] \to S_h$ *του προβλήματος* (3.39).

Απόδειξη. Το πρόβλημα (3.39) είναι ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Εφόσον η συνάρτηση $F(z) = \lambda|z|^2 z,\ z\in\mathbb{C}$ είναι τοπικά Lipschitz συνεχής συνάρτηση, το πρόβλημα (3.39) έχει μοναδική λύση, τουλάχιστον τοπικά. Για σταθερό h έστω $[0,t_h)$, $0\le t_h\le T$ το μέγιστο διάστημα ύπαρξης και μοναδικότητας της u_h. Από την (3.7) έπεται ότι

$$||u_h(t)||_\infty \le C_I h^{-\frac{d}{2}}||u_h(t)|| = C_I h^{-\frac{d}{2}}||u_h^0||,\ t\in[0,t_h).$$

Η ισότητα ισχύει λόγω της (3.40). Άρα

$$\sup_{t\in[0,t_h)} ||u_h(t)||_{L^\infty} \le C_I h^{-\frac{d}{2}}||u_h^0|| =: C(h),$$

δηλαδή η u_h είναι φραγμένη στο μέγιστο διάστημα ύπαρξής της. Από τη θεωρία των συνήθων διαφορικών εξισώσεων λαμβάνουμε ότι $t_h = T$, δηλαδή υπάρχει μοναδική λύση του προβλήματος (3.39) στο $[0,T]$. □

Θεώρημα 3.3. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για το ημιδιακριτό σχήμα) *Έστω u_h η μοναδική λύση του προβλήματος (3.39) και έστω ότι η u_h^0 ικανοποιεί την (1.5). Αν η λύση u του προβλήματος (3.1) είναι αρκούντως ομαλή, τότε υπάρχει $h_0 > 0$ έτσι, ώστε για κάθε $h \leq h_0$ να ισχύει η εκτίμηση*

$$\max_{0 \leq t \leq T} ||u(t) - u_h(t)|| \leq C(u)h^r, \tag{3.42}$$

όπου η σταθερά $C(u)$ εξαρτάται από τη u και τα δεδομένα του προβλήματος, όχι όμως από το h.

Απόδειξη. Έστω f η συνάρτηση του Πορίσματος 3.1 με $M := \sup_{t\in[0,T]} ||u(t)||_{L^\infty}+1$. Εφόσον $\sup_{t\in[0,T]} ||u(t)||_{L^\infty} \leq M$, τότε

$$f(u) = \lambda |u|^2 u \ \text{ στο } \ \bar{\Omega} \times [0, T].$$

Άρα η u είναι λύση του προβλήματος (3.9). Όμως το πρόβλημα (3.9) έχει μοναδική λύση και άρα

$$u = v \ \text{ στο } \bar{\Omega} \times [0, T].$$

Επομένως η εκτίμηση (3.16) γράφεται τώρα ως

$$\max_{0 \leq t \leq T} ||u(t) - v_h(t)|| \leq C(u)h^r. \tag{3.43}$$

Ορίζουμε τα ρ και θ όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 3.1. Τότε χρησιμοποιώντας τις (1.11), (3.7) και (3.43) λαμβάνουμε για $t \in [0, T]$ και $\varphi \in S_h$, ότι

$$\begin{aligned}
||u(t) - v_h(t)||_{L^\infty} &\leq ||\rho(t)||_{L^\infty} + ||\theta(t)||_{L^\infty} \\
&\leq ||u(t) - \varphi||_{L^\infty} + ||\varphi - R_h u(t)||_{L^\infty} + ||\theta(t)||_{L^\infty} \\
&\leq ||u(t) - \varphi||_{L^\infty} + C_I h^{-\frac{d}{2}}(||u(t) - \varphi|| + ||\rho(t)|| + ||\theta(t)||) \\
&\leq ||u(t) - \varphi||_{L^\infty} + C_I h^{-\frac{d}{2}}||u(t) - \varphi|| + C(u)h^{r-\frac{d}{2}}.
\end{aligned}$$

Επομένως,

$$||u(t) - v_h(t)||_{L^\infty} \leq C(u)(||u(t) - \varphi||_{L^\infty} + h^{-\frac{d}{2}}||u(t) - \varphi|| + h^{r-\frac{d}{2}}). \tag{3.44}$$

Από την (3.8) συμπεραίνουμε ότι υπάρχει $h_0 > 0$ $(r \geq 2)$ έτσι, ώστε για κάθε $h \leq h_0$ να ισχύει ότι

$$C(u)(||u(t) - \varphi||_{L^\infty} + h^{-\frac{d}{2}}||u(t) - \varphi|| + h^{r-\frac{d}{2}}) \leq 1. \tag{3.45}$$

Συνδυάζοντας τις (3.44) και (3.45) οδηγούμαστε στην

$$\begin{aligned}\sup_{t\in[0,T]}||v_h(t)||_{L^\infty} &\leq \sup_{t\in[0,T]}||u(t)||_{L^\infty} + \sup_{t\in[0,T]}||u(t)-v_h(t)||_{L^\infty}\\ &\leq 1+\sup_{t\in[0,T]}||u(t)||_{L^\infty} = M.\end{aligned}$$

Άρα για $h \leq h_0$,

$$f(v_h) = \lambda|v_h|^2 v_h \ \text{ στο } \ \bar{\Omega}\times[0,T].$$

Συνεπώς για $h \leq h_0$, η $v_h : [0,T] \to S_h$ είναι λύση του προβλήματος (3.39). Όμως το πρόβλημα (3.39) έχει μοναδική λύση. Επομένως για $h \leq h_0$,

$$v_h = u_h \ \text{ στο } \ \bar{\Omega}\times[0,T],$$

και η ζητούμενη εκτίμηση (3.42) προκύπτει από την (3.43). □

3.3.2 Το πλήρως διακριτό σχήμα

Διακριτοποιούμε το πρόβλημα (3.39) με τη μέθοδο Crank-Nicolson. Προκύπτουν έτσι, για $n = 0, 1, \ldots, N$, προσεγγίσεις $U^n \in S_h$ των $u^n := u(\cdot, t^n)$ που ικανοποιούν το σχήμα

$$\begin{cases}(\partial U^n,\varphi) + \mathrm{i}(\nabla U^{n+\frac{1}{2}},\nabla\varphi)\\ \qquad\qquad = \mathrm{i}\lambda\big(|U^{n+\frac{1}{2}}|^2U^{n+\frac{1}{2}},\varphi\big), \quad \forall\varphi\in S_h,\ 0\leq n\leq N-1,\\ U^0 = u_h^0,\end{cases} \tag{3.46}$$

Εύκολα μπορούμε και σε αυτή την περίπτωση να αποδείξουμε τη σχέση διατήρησης

$$\max_{0\leq n\leq N}||U^n|| = ||U^0||, \tag{3.47}$$

η οποία είναι το διακριτό ανάλογο της (3.2). Όμως δεν ισχύει το διακριτό ανάλογο της (3.3).

Πρόταση 3.4. (Ύπαρξη των U^n.) *Για $n = 0, 1, \ldots, N$, υπάρχουν U^n που ικανοποιούν το αναδρομικό σχήμα* (3.46).

Απόδειξη. Ορίζουμε τη συνάρτηση $\Phi : S_h \to S_h$ έτσι, ώστε

$$\big(\Phi(\varphi),\chi\big) = \frac{1}{2}\big[-(\nabla\varphi,\nabla\chi) + \lambda(|\varphi|^2\varphi,\chi)\big], \ \forall\varphi,\chi\in S_h.$$

Εργαζόμενοι όπως στην περίπτωση της Lipschitz συνεχούς συνάρτησης μπορούμε να αποδείξουμε ότι Φ είναι συνεχής. Επίσης από τον ορισμό της Φ το πρόβλημα (3.46) γράφεται ισοδύναμα ως

$$\begin{cases} U^{n+\frac{1}{2}} = U^n + \mathrm{i}k\Phi(U^{n+\frac{1}{2}}),\ 0 \le n \le N-1, \\ U^0 = u_h^0. \end{cases} \tag{3.48}$$

Για $n = 0$, το U^0 είναι προφανώς καλά ορισμένο. Για δεδομένο U^n ορίζουμε όπως και στην απόδειξη της Πρότασης 3.2 την απεικόνιση $\Pi : S_h \to S_h$ ως

$$\Pi(\varphi) := \varphi - U^n - \mathrm{i}k\Phi(\varphi),\ \varphi \in S_h.$$

Προφανώς η Π είναι συνεχής. Ακολουθώντας ακριβώς τα ίδια βήματα με την απόδειξη της Πρότασης 3.2 και ενθυμούμενοι ότι $\mathrm{Im}(|\varphi|^2\varphi, \varphi) = 0$ για $\varphi \in S_h$ καταλήγουμε στην

$$\mathrm{Re}\big(\Pi(\varphi), \varphi\big) \ge ||\varphi||(||\varphi|| - ||U^n||).$$

Επομένως για κάθε $\varphi \in S_h$ με $||\varphi|| = ||U^n|| + 1$ έχουμε ότι $\mathrm{Re}\big(\Pi(\varphi), \varphi\big) \ge 0$. Από το Λήμμα 3.1 συμπεραίνουμε ότι υπάρχει $\varphi^* \in S_h$ έτσι, ώστε $\Pi(\varphi^*) = 0$, δηλαδή συμπεραίνουμε την ύπαρξη U^{n+1} που ικανοποιεί την (3.46). □

Υπό κάποιες προϋποθέσεις μπορεί να αποδειχθεί και η μοναδικότητα της λύσης του προβλήματος (3.46). Επειδή όμως η απόδειξη της μοναδικότητας των U^n, $n = 0, 1, \ldots N$, είναι πολύ τεχνική, παραθέτουμε στη συνέχεια την αντίστοιχη πρόταση χωρίς απόδειξη.

Πρόταση 3.5. (Μοναδικότητα των U^n.) *Για $n = 0, 1, \ldots, N$, τα U^n που ικανοποιούν το πλήρως διακριτό σχήμα (3.46) είναι μοναδικά αν ισχύει μία από τις παρακάτω συνθήκες:*

(i) $d = 1$ *και*

$$||u_h^0|| \le c, \tag{3.49}$$

για κάποια σταθερά c ανεξάρτητη των h και k, όπου τα h και k είναι αρκούντως μικρά.

(ii) $d = 2$ *και* $|\lambda|\,||u_h^0||^2 < \frac{1}{2}$ *αν* $\lambda \le 0$ *ή* $\lambda||u_h^0||^2 < \frac{\sqrt{65}-1}{16}$ *αν* $\lambda > 0$.

(iii) $d = 2$ *και για* $n = 0, 1, \dots, N$, $|U^n|_4^4 = o(k^{-1})$ *καθώς* $k \to 0^+$ *και το* k *είναι αρκούντως μικρό.* $\square$

Στο σημείο αυτό θεωρούμε σκόπιμο να αναφέρουμε τα κύρια εργαλεία που απαιτούνται για την απόδειξη της παραπάνω πρότασης.

Για $d = 1$ βασικός είναι ο ρόλος της παρακάτω ανισότητας Sobolev (της οποίας η απόδειξη είναι πολύ εύκολη),

$$|w|_4^4 \leq ||w||^3 ||w_x||, \ \forall w \in H_0^1, \tag{3.50}$$

ενώ για $d = 2$, η (3.50) αντικαθίσταται από την ανισότητα Gagliardo-Nirenberg ([23]),

$$|w|_4^4 \leq \frac{1}{2} ||w||^2 ||\nabla w||^2, \ \forall w \in H_0^1. \tag{3.51}$$

Επίσης τόσο στη μονοδιάστατη όσο και στη δισδιάστατη περίπτωση γίνεται χρήση της σχέσης

$$|\, |z_1|^2 z_1 - |z_2|^2 z_2| \leq (|z_1| + |z_2|)^2 |z_1 - z_2|, \ \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C},$$

και του γεγονότος ότι το πρόβλημα (3.46) γράφεται ισοδύναμα στη μορφή (3.48).

Για περαιτέρω λεπτομέρειες παραπέμπουμε στο άρθρο [12].

Σχόλιο 3.1. Η (3.49) ισχύει για παράδειγμα αν η u_h^0 επιλεγεί ως η L^2-προβολή της u_0 στον S_h. Πράγματι στην περίπτωση αυτή έχουμε ότι

$$||u_h^0||^2 = (u_h^0, u_h^0) = (u_0, u_h^0) \leq ||u_0||\, ||u_h^0||.$$

Η δεύτερη ισότητα προκύπτει από τον ορισμό της L^2-προβολής.

Παρατήρηση 3.1. Η συνθήκη για $\lambda > 0$ στο (ii) της Πρότασης 3.5 είναι ποιοτικά σωστή εφόσον, όπως αναφέραμε στην αρχή του παρόντος κεφαλαίου, για $\lambda > 0$ η λύση του προβλήματος μπορεί να εκρήγνυται σε πεπερασμένο χρόνο αν $\lambda ||u_0||^2 > 4$.

Θεώρημα 3.4. (Εκ των προτέρων εκτίμηση για την κυβική NLS.) *Υποθέτουμε ότι η ακριβής λύση* u *του προβλήματος* (3.1) *είναι αρκετά ομαλή και ότι ισχύει η* (1.5). *Υποθέτουμε ακόμα ότι* $k = o(h^{\frac{d}{4}})$. *Τότε υπάρχει μοναδική λύση* U^n, $n = 0, 1, \dots, N$, *του* (3.46) *που ικανοποιεί την εκ των προτέρων εκτίμηση*

$$\max_{0 \leq n \leq N} ||u^n - U^n|| \leq C(u)(h^r + k^2), \tag{3.52}$$

όπου $u^n := u(\cdot, t^n)$, $n = 0, 1, \dots, N$ *και η σταθερά* $C(u)$ *εξαρτάται από τη* u *και τα δεδομένα του προβλήματος, όχι όμως από τα* h *και* k.

Απόδειξη. Έστω και πάλι f η συνάρτηση του Πορίσματος 3.1 με $M := \sup_{t\in[0,T]} ||u(t)||_{L^\infty}+1$. Εφόσον $\sup_{t\in[0,T]} ||u(t)||_{L^\infty} \leq M$ η εκτίμηση (3.26) γράφεται ως (βλέπε την απόδειξη του Θεωρήματος 3.3)

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^n - V^n|| \leq C(u)(h^r + k^2). \tag{3.53}$$

Για $n = 0, 1, \dots, N$, ορίζουμε τα ρ^n και θ^n όπως στην απόδειξη του Θεωρήματος 3.2. Χρησιμοποιώντας τις (1.11), (3.7) και (3.53) παίρνουμε για $n = 0, 1, \dots, N$ και $\varphi \in S_h$, ότι

$$\begin{aligned} ||u^n - V^n||_{L^\infty} &\leq ||u^n - \varphi||_{L^\infty} + ||\varphi - R_h u^n||_{L^\infty} + ||\theta^n||_{L^\infty} \\ &\leq ||u^n - \varphi|| + C_I h^{-\frac{d}{2}}(||u^n - \varphi|| + ||\rho^n|| + ||\theta^n||) \\ &\leq ||u^n - \varphi||_{L^\infty} + C_I h^{-\frac{d}{2}}||u^n - \varphi|| + C(u)(h^{r-\frac{d}{2}} + k^2 h^{-\frac{d}{2}}). \end{aligned}$$

Επομένως για $n = 0, 1, \dots, N$ και $\varphi \in S_h$,

$$||u^n - V^n||_{L^\infty} \leq C(u)(||u^n - \varphi||_{L^\infty} + h^{-\frac{d}{2}}||u^n - \varphi|| + h^{r-\frac{d}{2}} + k^2 h^{-\frac{d}{2}}). \tag{3.54}$$

Εφόσον $k = o(d^{\frac{d}{4}})$, από την (3.8) συμπεραίνουμε ότι υπάρχουν $k_0 > 0$ και $h_0 > 0$ έτσι, ώστε για κάθε $k \leq k_0$ και $h \leq h_0$ να ισχύει

$$C(u)(||u^n - \varphi||_{L^\infty} + h^{-\frac{d}{2}}||u^n - \varphi|| + h^{r-\frac{d}{2}} + k^2 h^{-\frac{d}{2}}) \leq 1. \tag{3.55}$$

Από τις (3.54) και (3.55) οδηγούμαστε στην

$$\max_{0\leq n\leq N} ||u^n - V^n||_{L^\infty} \leq 1. \tag{3.56}$$

Συνδυάζοντας τις (3.55) και (3.56) παίρνουμε ότι

$$\begin{aligned} &\max_{0\leq n\leq N-1} ||V^{n+\frac{1}{2}}||_{L^\infty} \leq \max_{0\leq n\leq N-1} (||u^{n+\frac{1}{2}} + ||u^{n+\frac{1}{2}} - V^{n+\frac{1}{2}}||_{L^\infty}) \\ &\max_{0\leq n\leq N-1} \big[\frac{1}{2}(||u^n||_{L^\infty} + ||u^{n+1}||_{L^\infty}) + \frac{1}{2}(||u^n - V^n||_{L^\infty} + ||u^{n+1} - V^{n+1}||_{L^\infty})\big] \\ &\leq \sup_{t\in[0,T]} ||u(t)||_{L^\infty} + 1 = M. \end{aligned}$$

Δηλαδή για $k \leq k_0$, $h \leq h_0$ και $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$f(V^{n+\frac{1}{2}}) = \lambda |V^{n+\frac{1}{2}}|^2 V^{n+\frac{1}{2}} \quad \text{στο} \quad \bar{\Omega}.$$

Συνεπώς για $k \leq k_0$ και $h \leq h_0$ τα V^n, $n = 0, 1, \dots, N$, αποτελούν λύση για το πρόβλημα (3.46). Άρα αρκεί να δείξουμε ότι οι λύσεις που ικανοποιούν την (3.53) είναι υποχρεωτικά μοναδικές. Τότε θα έχουμε $V^n = U^n$, $n = 0, 1, \ldots, N$ και η (3.52) θα προκύψει από την (3.53). Έχουμε λοιπόν, χρησιμοποιώντας τις (1.11), (3.7) και (3.53), για $n = 0, 1, \ldots, N$ και $\varphi \in S_h$, ότι

$$\begin{aligned} ||u^n - V^n||_{L^\infty} &\leq ||V^n - \varphi||_{L^\infty} + ||u^n - \varphi||_{L^\infty} \\ &\leq C_I h^{-\frac{d}{2}} ||V^n - \varphi|| + c(h^{-\frac{d}{2}} ||u^n - \varphi|| + ||u^n - \varphi||_{L^\infty}) \\ &\leq C(u)(h^{-\frac{d}{2}} ||u^n - \varphi|| + ||u^n - \varphi||_{L^\infty} + h^{r-\frac{d}{2}} + k^2 h^{-\frac{d}{2}}). \end{aligned}$$

Επομένως εργαζόμενοι όπως στην απόδειξη της (3.56) λαμβάνουμε για k και h αρκούντως μικρά ότι

$$\max_{0 \leq n \leq N} ||u^n - V^n||_{L^\infty} \leq 1.$$

Συνεπώς,

$$\max_{0 \leq n \leq N} ||V^n||_{L^\infty} \leq C, \tag{3.57}$$

όπου η σταθερά C είναι ανεξάρτητη των k και h. Από την Πρόταση 3.5 έπεται ότι οι λύσεις που ικανοποιούν την (3.57) είναι μοναδικές. Πράγματι για $d = 1$ αυτό είναι προφανές, αν τα k, h είναι αρκούντως μικρά, ενώ για $d = 2$ παίρνουμε από την (3.57) ότι

$$\max_{0 \leq n \leq N} |V^n|_4^4 \leq C \max_{0 \leq n \leq N} ||V^n||_{L^\infty} \leq C, \tag{3.58}$$

με τη σταθερά C να είναι ανεξάρτητη από τα k και h. Η μοναδικότητα προκύπτει για $d = 2$ από το (iii) της Πρότασης 3.5 και την (3.58) υπό την προϋπόθεση ότι το k είναι αρκούντως μικρό. Επομένως οι λύσεις του προβλήματος (3.46) που ικανοποιούν την (3.53) είναι υποχρεωτικά μοναδικές και αυτό ολοκληρώνει την απόδειξη του θεωρήματος. □

Συμπεράσματα-Μελλοντική εργασία

Στην εργασία αυτή μελετήθηκαν αριθμητικά σχήματα και αποδείχθηκαν εκ των προτέρων εκτιμήσεις για τις εξισώσεις τύπου Schrödinger. Συγκεκριμένα για τη γενική και τη συνηθισμένη μορφή της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger καθώς επίσης και για την κυβική NLS θεωρήθηκε το αριθμητικό σχήμα στο οποίο η διακριτοποίηση ως προς το χώρο έγινε με πεπερασμένα στοιχεία και ως προς το χρόνο με τη μέθοδο Crank-Nicolson. Η απόδειξη εκ των προτέρων εκτιμήσεων για την κυβική NLS δεν ήταν τόσο απλή όπως στη γραμμική περίπτωση εξαιτίας της παρουσίας του μη γραμμικού όρου. Έτσι η απόδειξη των εκτιμήσεων στην περίπτωση αυτή επιτεύχθηκε μέσω κάποιων γνωστών τεχνασμάτων.

Για τη γραμμική εξίσωση Schrödinger ημικλασικού τύπου οι εκ των προτέρων εκτιμήσεις που αποδείχθηκαν για το αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων στοιχείων και μεθόδου Crank-Nicolson και για τα αριθμητικά σχήματα της Lie splitting φασματικής μεθόδου και της Strang splitting φασματικής μεθόδου έδειξαν ότι οι δύο τελευταίες μέθοδοι υπερτερούν έναντι της πρώτης όσον αφορά την επιλογή του χωρικού και χρονικού βήματος σε σχέση με την παράμετρο ε. Μάλιστα αποδείχθηκε ότι στην περίπτωση που το δυναμικό είναι σταθερή συνάρτηση, το χρονικό βήμα στην περίπτωση των splitting φασματικών μεθόδων μπορεί να επιλεγεί ανεξάρτητα από τη σταθερά του Planck· κάτι τέτοιο δε συμβαίνει στην περίπτωση των πεπερασμένων στοιχείων και της μεθόδου Crank-Nicolson. Για τους παραπάνω λόγους λοιπόν, οι splitting φασματικές μέθοδοι δείχνουν να είναι οι πλέον κατάλληλες μέθοδοι για την αριθμητική επίλυση της γραμμικής εξίσωσης Schrödinger ημικλασικού τύπου, μιας και η συγκεκριμένη εξίσωση μας ενδιαφέρει κυρίως στην περίπτωση που η σταθερά του Planck είναι πολύ κοντά στο μηδέν.

Όπως αναφέραμε και στην εισαγωγή, λόγω των πολλών εφαρμογών των εξισώσεων Schrödinger στη Φυσική και την Τεχνολογία, υπάρχουν αρκετές εργασίες στις οποίες αποδεικνύονται εκ των προτέρων εκτιμήσεις για διάφορα αριθμητικά σχήματα για τις εξισώσεις αυτές. Παρόλα αυτά, δεν υπάρχει καμία εργασία στην οποία να αποδεικνύονται βέλτιστης τάξης εκ των υστέρων εκτιμήσεις για τις εξισώσεις Schrödinger. Η απόδειξη εκ των υστέρων εκτιμήσεων θα βοηθήσει στην περεταίρω κατανόηση της συμπεριφοράς των προσεγγιστικών λύσεων σε σχέση με τις ακριβείς λύσεις, τόσο για τις γραμμικές εξισώσεις Schrödinger, όσο και για την κυβική NLS. Γι' αυτό επόμενός μας στόχος είναι η απόδειξη εκ των υστέρων εκτιμήσεων βέλτιστης τάξης γι' αυτού του είδους τις εξισώσεις. Η δραστηριότητα που υπάρχει τα τελευταία χρόνια στο χώρο των εκ των υστέρων εκτιμήσεων για χρονοεξαρτώμενα προβλήματα κάνει το στόχο τούτο να φαντάζει εφικτός...

Βιβλιογραφία

[1] A. Galindo, P. Pascual, *Quantum mechanics I*, Springer-Verlag, Berlin, 1990.

[2] S. K. Gray, J. M. Verosky, *Classical hamiltonian structures in wave packet dynamics*, J. Chem. Phys. **100** (1994), 5011-5022.

[3] F. Schmidt, D. Yevick, *Discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations*, J. Comput. Phys. **134** (1997), 96-107.

[4] F. Collino, *Perfectly matched absorbing layers for the paraxial equations*, J. Comput. Phys. **131** (1997), 164-180.

[5] W. A. Strauss, *The nonlinear Schrödinger equation*, In: de la Penha, G. M. Medeiros, L. A. J. (eds.) Contemporary Developments in Continuum Mechanics and Partial Differential Equations, New York: North-Holland, 1978.

[6] J. J. Rasmussen, K. Ryptal, *Blow-up in nonlinear Schrödinger equations-I. A general review*, Phys. Scr. **33** (1986), 481-497.

[7] W. Bao, S. Jin, P. A. Markowich, *On time-splitting spectral approximations for the Schrödinger equation in the semiclassical regime*, J. Comput. Phys. **175** (2002), 487-524.

[8] X. Antoine, C. Besse, V. Mouysset, *Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions*, Math. Comput. **248** (2004), 1779-1799.

[9] A. Ashyralyev, A. Sirma, *Nonlocal boundary value problems for the Schrödinger equation*, Comput. Math. Appl. **55** (2008), 392-407.

[10] A. Borzi, E. Decker, *Analysis of a leap-frog pseudospectral scheme for the Schrödinger equation*, J. Comput. Appl. Math. **193** (2006), 65-88.

[11] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *A high order finite element discritization with local absorbing boundary conditions of the linear Schrödinger equation*, J. Comput. Phys. **220** (2006), 409-421.

[12] G. Akrivis, V. Dougalis, O. Karakashian, *On fully discrete Galerkin method-s of second-order temporal accuracy for the nonlinear Schrödinger equation*, Numer. Math. **59** (1991), 31-53.

[13] O. Karakashian, Ch. Makridakis, *A space-time finite element method for the nonlinear Schrödinger equation: The discontinous Galerkin method*, Math. Comp. **67**(1998), 479-499.

[14] O. Karakashian, Ch. Makridakis, *A space time finite element method for the nonlinear Schrödinger equation: The continuous Galerkin method*, SIAM J. Numer. Anal. **36** (1999), 1779 -1807.

[15] G. E. Zouraris, *On the convergence of a linear two-step finite element method for the nonlinear Schrödinger equation*, Math. Model. Numer. Anal. **35** (2001), 389-405.

[16] W. Bao, S. Jin, P. A. Markowich, *Numerical study of time-splitting spectral discretizations of nonlinear Schrödinger equations in the semiclassical regimes*, SIAM J. Sci. Comput. **25** (2003), 27-64.

[17] S. Larsson, V. Thomée, *Partial Differential Equations with Numerical Methods*, Springer-Verlag, Berlin, 2003.

[18] V. Thomée, *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*, 2^{nd} edition, Springer-Verlag, Berlin, 2006.

[19] T. Jahnke, C. Lubich, *Error bounds for exponential operator splittings*, BIT **40** (2000), 735-744.

[20] V. Gradinaru, *Strang splitting for the time dependent Schrödinger equation on sparse grids*, SIAM J. Numer. Anal. **46** (2007), 103-123.

[21] C. Besse, B. Bidégaray, S. Descombes, *Order estimates in time of splitting for the nonlinear Schrödinger equations*, SIAM J. Numer. Anal. **40** (2002), 26-40.

[22] J. E. Pasciak, *Spectral and pseudo spectral methods for advection equations*, Math. Comp. **35** (1980), 1081-1092.

[23] H. Brezis, T. Gallouet, *Nonlinear Schrödinger evolution equations*, Nonlinear Analysis **4** (1980), 677-681.

[24] A. Vargas, L. Vega, *Global well posedness for 1D non-linear Schrödinger equation for data with an infinite L^2-norm*, J. Math. Pures Appl. **80** 2001, 1029-1044.

[25] F. Merle, P. Raphael, *On universality of blow up profile for L^2 critical nonlinear Schrödinger equation*, Invent. math. **156** (2004), 565-672.

[26] F. Merle, P. Raphael, *On a sharp lower bound on the blow up rate for critical nonlinear Schrödinger equation*, J. Amer. Math. Soc. **19** (2006), 37-90.

[27] M. Delfour, M. Fortin, G. Payre, *Finite-difference solutions of a non-linear Schrödinger equation*, J. Comput. Phys. **44** (1981), 277-288.

[28] L. C. Evans, *Partial Differential Equations*, 2nd edition, American Mathematical Society, 2002.

[29] Σ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική Ι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 2005.

[30] Γ. Δ. Ακρίβης, *Μέθοδοι Πεπερασμένων Στοιχείων* (πανεπιστημιακές παραδόσεις), Λευκωσία, 2005.

[31] M. Spivac, Διαφορικός και Ολοκληρωτικός Λογισμός, 4η έκδοση, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1995.