



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

GRUPO DE ÓPTICA QUÂNTICA

Método compacto de diferenças finitas para resolver equações de Schrödinger não lineares com dispersão de quarta ordem

HUGO NAVES DE JESUS

ORIENTADOR: WESLEY BUENO CARDOSO

Goiânia - 2016

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR AS TESES E DISSERTAÇÕES ELETRÔNICAS NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou *download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

1. Identificação do material bibliográfico: **Dissertação** **Tese**

2. Identificação da Tese ou Dissertação

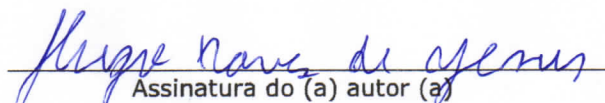
Nome completo do autor: Hugo Naves de Jesus

Título do trabalho: Método Compacto de Diferenças Finitas para Resolver Equações de Schrödinger Não Lineares com Dispersão de Quarta Ordem

3. Informações de acesso ao documento:

Concorda com a liberação total do documento SIM NÃO¹

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.


Assinatura do (a) autor (a)

Data: 10 / 10 / 2016

¹ Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. A extensão deste prazo suscita justificativa junto à coordenação do curso. Os dados do documento não serão disponibilizados durante o período de embargo.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

GRUPO DE ÓPTICA QUÂNTICA

Método compacto de diferenças finitas para resolver equações de Schrödinger não lineares com dispersão de quarta ordem

POR

HUGO NAVES DE JESUS

Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como um dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

ORIENTADOR: WESLEY BUENO CARDOSO

Goiânia - 2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do
Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Naves de Jesus, Hugo

Método compacto de diferenças finitas para resolver equações de
Schrödinger não lineares com dispersão de quarta ordem [manuscrito] /
Hugo Naves de Jesus. - 2016.

194 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto
de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2016.

Bibliografia.

Inclui siglas, símbolos, gráfico, tabelas.

1. Compact-SSFD. 2. Métodos de Diferenças Finitas. 3. Dispersão
de Quarta Ordem. 4. Sólitons. 5. Equação de Schrödinger Não Linear . I.
Bueno Cardoso, Wesley, orient. II. Título.

CDU 53



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Ata N^o 165 de defesa de dissertação de Hugo Naves de Jesus para obtenção do título de Mestre em Física.

Aos 16 dias do mês de setembro de 2016, às 14h00min, no Miniauditório do Instituto de Física, reuniu-se a Banca Examinadora indicada pela Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação, aprovada pelo Conselho Diretor e designada pela Diretoria do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, composta pelo Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso (orientador – IF/UFG), Prof. Dr. Dionisio Bazeia Filho (DF/UFPB) e Prof. Dr. Ardiley Torres Avelar (IF/UFG), para julgar a dissertação de mestrado de Hugo Naves de Jesus, intitulada: “Método compacto de diferenças finitas para resolver equações de Schrödinger não lineares com dispersão de quarta ordem”. O Presidente abriu os trabalhos agradecendo a presença dos membros da Banca Examinadora e concedeu a palavra a Hugo Naves de Jesus, que expôs detalhadamente seu trabalho. Em seguida, os membros da Banca fizeram suas considerações e procederam à arguição do candidato. Concluída essa etapa, a Banca, em sessão fechada, deu prosseguimento ao julgamento do trabalho, atribuindo os seguintes conceitos:

Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso (orientador)

APROVADO

Prof. Dr. Dionisio Bazeia Filho (DF/UFPB)

APROVADO

Prof. Dr. Ardiley Torres Avelar (IF/UFG)

APROVADO

Novamente em sessão aberta, o presidente da Banca anunciou o resultado final do julgamento, declarando o candidato Hugo Naves de Jesus APROVADO pela Banca Examinadora. Nada mais havendo a tratar, a sessão foi encerrada e lavrou-se a presente ata que segue assinada pelos membros da Banca Examinadora.

Goiânia, 16 de setembro de 2016.

Wesley B. Cardoso
Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso (Orientador)

Dionisio Bazeia Filho
Prof. Dr. Dionisio Bazeia Filho (DF/UFPB)

Ardiley Torres Avelar
Prof. Dr. Ardiley Torres Avelar (IF/UFG)

Agradecimentos

A Deus por ter tornado possível a conclusão deste trabalho, orando conheci o Teu amor, errando conheci a Tua justiça, retornando aos Teus caminhos conheci Teu perdão.

À família. No inverno fomos o abrigo um dos outros, na tempestade o farol, no deserto o oásis, no naufrágio o resgate, na guerra a fortaleza, na tristeza a canção...

À memória de meu pai, o tempo e o acaso não permitiram que eu retribuísse-lhe o carinho, a educação e a vida que me deu.

Ao Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso, pela orientação, pela motivação e confiança.

Aos professores que se dispuseram à ler a dissertação e a participar da banca.

Ao CNPq.

Ao grande amigo Júlio Fágner. Espero retribuir-lhe a imensidão de favores seus e de tua família.

Aos amigos Yuri, Ilton, Vitor, Vanuildo, Júnior, Rodrigo, Laurinda, Valdiglei e os coiotes Nilton e Kliver, pela vossa amizade, pelas boas conversas, e por todas as palavras que me fortaleceram.

*“Foi o melhor dos tempos, foi o pior dos tempos
foi a idade da sabedoria, foi a idade da tolice
foi a época da fé, foi a a época da incredulidade
foi a estação da luz, foi a estação das trevas
foi a primavera da esperança, foi o inverno do desespero
tínhamos tudo diante de nós, tínhamos nada diante de nós.”*
— CHARLES DICKENS

Sumário

1	Introdução	2
2	Introdução as Equações Diferenciais Parciais (PDE)	8
2.1	Introdução	8
2.2	Classificação das Equações Diferenciais Parciais	9
2.2.1	Classificação de Acordo com a Linearidade	9
2.2.2	Equações Diferenciais Parciais de Segunda Ordem	9
2.2.3	Equações Diferenciais Parciais Hiperbólicas	12
2.2.4	Equações Diferenciais Parciais Parabólicas	13
2.2.5	Equações Diferenciais Parciais Elípticas	14
2.3	Problemas de Valor Inicial e de Contorno	14
2.3.1	Problemas de Valores de Contorno	15
2.3.2	Problemas de Valor Inicial e Problemas de Cauchy	15
3	Sólitons e a Equação de Schrödinger Não Linear	17
3.1	Sólitons Ópticos	18
3.2	A Equação de Schrödinger Não Linear	18
4	Introdução aos Métodos Numéricos Aplicados à Equações Diferenciais	21
4.1	Métodos de Diferenças Finitas para discretização de Equações Diferenciais	22
4.2	Análises de Estabilidade	32
4.2.1	O Método de Fourier	33
4.2.2	O Método de Estabilidade Matricial	39
4.2.3	Obtendo a Condição Para Estabilidade Através da Norma Matricial	42
4.2.4	Observações Sobre o Método Matricial, Método de Fourier e Translações	43
4.3	Convergência e Consistência	50
4.3.1	Convergência	50
4.3.2	Consistência	52
4.4	O método Split-Step para sistemas de EDO	54

4.4.1	O Split-Step como método de discretização de Equações Diferenciais Lineares	57
4.4.2	O método Split-Step Para Equações Diferenciais Não Lineares	59
5	Método de Diferenças Finitas <i>Compact</i> com <i>Split-step</i> Aplicado à NLSE	64
5.1	Introdução	64
5.2	Descrição Geral do Trabalho Original	65
5.3	Simulações	66
5.4	Outros Testes	70
6	Estudo e Implementação do Método <i>Compact</i> aplicado à FODNSE	74
6.1	Descrição do Trabalho	74
6.2	Dedução do Método Convencional para Dispersão de Quarta Ordem	75
6.3	Estudos Para a Obtenção do Método Compact para Dispersão de Quarta Ordem . . .	76
6.4	Implementação do Método Compact	79
6.5	Conclusão	84
7	Comentários Finais e Perspectivas	86
	Referências Bibliográficas	88

Capítulo 1

Introdução

A Equação de Schrödinger Não Linear (NLSE de *Nonlinear Schrödinger Equation*) governa pacotes de ondas dispersivos e fracamente não lineares em certos sistemas físicos. Ela é usada no estudo de fenômenos que vai desde a hidrodinâmica [1], física de plasmas [2,3], propagação de calor em cristais [4], processos termodinâmicos em sistemas de mesoescalas [5], dinâmica de condensados de Bose-Einstein [6–9], filmes magnéticos finos [10–14], óptica não linear, etc [15]. A forma mais conhecida é

$$i\partial_t\psi + \beta_2\partial_x^2\psi + \gamma|\psi|^2\psi = 0, \quad (1.1)$$

na qual foi usada a notação simplificada $\partial_t\psi \equiv \partial\psi/\partial t$ e $\partial_x^n\psi = \partial^n\psi/\partial x^n$, com $\psi = \psi(x,t)$. β_2 e γ são os coeficientes de dispersão e não linearidade respectivamente e podem depender do tempo. Há casos em que termos lineares ou não lineares de ordem superior precisam ser incluídos [16].

Ela é uma equação fundamental da óptica não linear, sendo ela a equação responsável para descrever a propagação de pulsos de luz monocromática em fibras ópticas no regime de largura inicial de pulso $T_0 > 5$ ps e comprimento de onda que não seja tão próximo do comprimento de onda de dispersão zero λ_D (o comprimento de onda de dispersão zero é o comprimento de onda para o qual β_2 se anula). Em muitos problemas físicos práticos a NLSE não é integrável [17], o que torna mais difícil encontrar soluções analíticas que descrevam sólitons [18]. Mas mesmo quando é possível resolvê-la analiticamente suas soluções podem não ser estáveis. Entre os métodos que têm sido empregados ultimamente para se obter as soluções analíticas estão o método transformação de similaridade, o método G'/G , o método tanh-coth, o método de expansão F, o método da função ex-

ponencial, simetria de Lie, entre outros (veja [19] e as referências citadas) que são métodos que realizam a integração da equação governante mesmo que o teste de Painlevé de integrabilidade indique que a equação seja não integrável [19]. Podemos citar também outros métodos como a amplitude-fase acoplada, transformações de Bäcklund-Darboux, método de Hirota [17], etc. Uma outra ferramenta matemática bastante poderosa é o método do espalhamento inverso para equações diferenciais, porém sua aplicação emprega uma matemática mais complicada e funciona apenas para sistemas integráveis [20]. Há trabalhos que fazem uso de *ansätze* para encontrar soluções analíticas [17, 21–27]. Há também abordagens que trabalham com soluções aproximadas como os métodos de perturbação e os métodos numéricos, sendo este último o assunto principal do nosso trabalho.

O uso de métodos numéricos são de grande importância em trabalhos que envolvem a NLSE. Um exemplo da relevância desse tipo de abordagem são as colisões elásticas de sólitons KdV e espalhamento fractal em interações entre sólitons, que são fenômenos que foram descobertos primeiro por meio de simulações numéricas [16]. Métodos numéricos são importantes para se estudar ambos os sistemas integráveis e não integráveis [16].

Para sólitons ópticos, simulações numéricas podem ser usadas para se fazer o cálculo do *espectro de estabilidade linear*, cálculo da *solução da onda solitária* e cálculos da *simulação da evolução* [16]. O cálculo do espectro de estabilidade linear é feito para se verificar se uma onda solitária será estável sob pequenas perturbações. Essa é uma questão importante pois somente feixes auto aprisionados estáveis, ou fracamente instáveis, podem ser observados experimentalmente. Os cálculos da solução de onda solitária são feitos pois a equação de onda não linear possui soluções especiais localizadas que podem manter sua forma sob propagação. Se elas forem estáveis podem se tornar uma parte não nula das soluções para tempos longos e podem mesmo dominar a solução para tempos longos. Mesmo que sejam instáveis elas ainda são importantes na compreensão da dinâmica da solução, por exemplo, na teoria de colapso da solução [28].

As simulações de evolução são feitas para se observar o comportamento de ondas solitárias à medida em que se propagam. Um dos grandes triunfos obtido pelas simulações de evolução,

foi um trabalho realizado por Zabusky and Kruskal (1965) para a Equação KdV, que conduziu à descoberta de sólitons e a criação do Método do Espalhamento Inverso [16]. Essas simulações são feitas geralmente observando como um perfil de pulso inicial se comporta com o passar do tempo. Esse perfil inicial pode ser um que obtivemos analiticamente, ou pode ser uma solução tentativa que nos indica como um pulso de onda, que a princípio não corresponde à um sólito óptico, quando inserido em uma fibra óptica, vai evoluir dentro da fibra até formar um sólito. A Ref. [20] nos dá uma ilustração deste processo, como podemos ver na Fig. 1.1, quando um pulso inicial $\psi(0, \tau) = \text{sech}(\tau)e^{-iC\tau^2/2}$, onde C é conhecido como *chirping parameter*, é inserido em uma fibra óptica regido pela Eq. (1.1). Para esta simulação numérica em particular foi usado $C = 0.5$. Para este valor de C , somente 83% da energia do pulso inicial foi convertida em sólito.

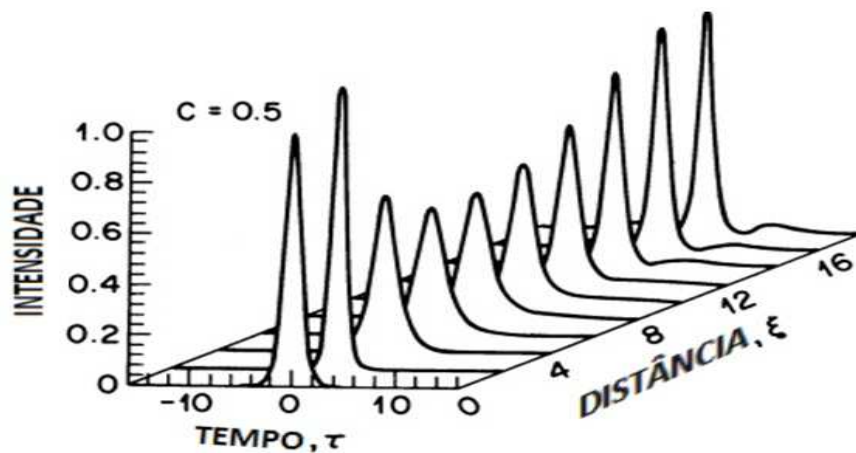


Figura 1.1: Evolução de um pulso inicial $\psi(0, \tau) = \text{sech}(\tau)e^{-iC\tau^2/2}$ dentro de uma fibra óptica, com $C = 0.5$ até a formação de um sólito. Esta figura foi retirada da Ref. [20]

Devido sua relevância, uma ampla quantidade de técnicas numéricas têm sido desenvolvidas e aprimoradas para resolver a NLSE, principalmente com o propósito de aumentar a precisão numérica [16]. Há duas grandes classes de métodos numéricos usados: os métodos de diferenças finitas e os métodos espectrais.

Métodos espectrais podem ser mais rápidos em uma ordem de magnitude [20] e sua precisão espacial é espectral, que dá uma ordem de aproximação muito melhor do que diferenças finitas [16]. Porém, eles são interessantes para soluções que oscilam pouco. Existe uma grande quantidade de métodos espectrais, porém os mais usados são o *método pseudo-espectral*, o *método do fator*

integrante e o *split-step* para o método de Fourier (SSFM, de *split-step Fourier method*). O método SSFM usa uma técnica chamada *split-step* para separar os termos de uma equação diferencial e resolvê-los separadamente. No caso da NLSE, o *split-step* é usado para separar a parte linear da parte não linear, tal que a parte não linear é resolvida exatamente enquanto a parte linear é resolvida usando-se a *transformada de Fourier discreta* (DFT de *discrete Fourier transform*). Uma vantagem deste método, além de uma boa precisão numérica, é que a transformada de Fourier discreta pode ser computada usando-se uma técnica chamada de *transformada de Fourier rápida* (FFT de *fast Fourier transform*), com baixo custo computacional. Métodos espectrais fazem uma representação global das funções através de séries de Fourier e polinômios de altas ordens.

Em contraste, métodos de diferenças finitas, assim como métodos de elementos finitos, fazem representações locais de funções através de polinômios de baixas ordens. Nosso trabalho irá utilizar o método *split-step* combinado com métodos de diferenças finitas (SSFD e Compact-SSFD), que obviamente não se encaixam na classe dos métodos espectrais¹. Nos baseamos no trabalho [15], em que os autores separam as partes lineares e não lineares da NLSE para resolvê-las separadamente, tal que a parte não linear é resolvida exatamente e a parte linear é resolvida usando métodos de diferenças finitas de ordem superior. Os resultados dos autores foram reproduzidos em nosso trabalho.

Há vantagens em usar-se métodos de diferenças finitas ao invés de métodos espectrais. Entre elas está o fato de que nos métodos de diferenças finitas podemos incluir tranquilamente as condições de contorno. Na Ref. [29] Trefethen destaca: “*Métodos espectrais são muito mais afetados do que métodos de diferenças finitas na presença das condições de contorno, que tendem a introduzir problemas de estabilidade que são mal compreendidos e algumas vezes altamente restritivos no que diz respeito aos intervalos temporais. Desta forma, dificuldades com os contornos são as razões primárias de os métodos espectrais ainda não terem ultrapassado os métodos de diferenças finitas.*”

Uma outra situação em que os métodos espectrais não são recomendados é quando temos pulsos

¹É muito comum autores dizerem que estão usando o método *split-step* sem deixar claro se é o SSFM ou o SSFD. Geralmente quando esta especificação não é feita, eles estão se referindo ao SSFM.

ultracurtos, cujo a largura é tão pequena que o pulso contém poucos ciclos ópticos [20]. Em tais situações a aproximação de envelopes que variam lentamente não podem ser usadas.

A equação estudada em nosso trabalho é a Equação de Schrödinger Não Linear com Dispersão de Quarta Ordem (FODNLSE), que é uma variante da NLSE, com um termo a mais contendo uma derivada de quarta ordem. Tais equações são úteis para descrever pulsos solitônicos ultracurtos (pulsos com largura inicial $T_0 < 5$ ps são considerados ultracurtos) [20, 30].

Este trabalho está organizado da seguinte forma: No Capítulo 2 faremos uma breve introdução à teoria de Equações Diferenciais Parciais. Os tópicos abordados serão necessários para melhor compreensão de alguns conceitos importantes em métodos numéricos. Um destes conceitos é a Condição de Courant, usada para fazer-se análises de estabilidade e otimização de simulações numéricas. No Capítulo 3 falaremos sobre a Equação de Schrödinger Não Linear e suas variantes, em especial a Equação de Schrödinger Não Linear de Quarta Ordem (FONLSE, de *Fourth-Order Nonlinear Schrödinger Equation*), que é o foco principal de nosso trabalho. No Capítulo 4 falaremos sobre métodos de diferenças finitas, daremos exemplos de alguns deles e demonstraremos como são obtidos através de Séries de Taylor. Neste mesmo capítulo falaremos também sobre análise de estabilidade, consistência e convergência de métodos numéricos. As análises de estabilidade que vamos descrever são o Método de Fourier e o Método Matricial. Em seções seguintes demonstraremos que estes dois métodos estão relacionados. Ainda no Capítulo 4 falaremos sobre Métodos *Split-Step*, amplamente usados em métodos numéricos para separar-se as partes de uma equação diferencial. No Capítulo 5 iremos simular os resultados do trabalho de Dehghan e Taleei para a propagação de um único sóliton e para a colisão entre dois sólitons. Além dos resultados dos trabalhos originais fizemos também outras simulações para os métodos SSFD e Compact-SSFD. No Capítulo 6 mostramos quais foram nossas tentativas para desenvolver um método *compact* para a derivada quarta. Uma das dificuldades que encontramos foi como, depois de desenvolver um método *compact* para a derivada quarta, combinar com o conhecido método *compact* para a derivada segunda e implementá-lo na simulação da FONLSE. Fizemos alguns testes e descobrimos que os termos com derivadas segunda e derivada quarta da FONLSE podem ser separados tranquilamente através do método *split-step*, sem

comprometer a propagação e a precisão numérica, embora ele notoriamente tenha um custo computacional maior. Depois de implementá-lo verificamos que o método *compact* para a derivada quarta que desenvolvemos não deu melhor precisão numérica como esperávamos. Ao final do capítulo e na conclusão do trabalho demos algumas explicações de porque nosso método não funcionou e se seria possível obter um para a derivada quarta.

Capítulo 2

Introdução as Equações Diferenciais Parciais (PDE)

2.1 Introdução

Um dos grandes desafios em física consiste em encontrar um modelo matemático que represente de forma mais fiel possível o sistema que está sendo estudado. Geralmente propõe-se uma equação diferencial com um conjunto apropriado de condições chamadas de condições auxiliares, cuja soluções serão funções que descrevem o comportamento do sistema. A maioria dos problemas comuns em física são classificados em três categorias: *problemas de equilíbrio*, *problemas de autovalores* e *problemas de propagação*.

Problemas de equilíbrio são problemas de estado estacionário. Exemplos físicos para estes tipos de problemas incluem distribuições estacionárias de temperatura, fluxos estacionários viscosos, distribuições estacionárias de voltagem e tensionamento elástico de estruturas em equilíbrio [31]. As condições auxiliares requeridas são as condições de contorno.

Problemas de autovalores são considerados como extensões dos problemas de equilíbrio e não vamos descrevê-los detalhadamente neste capítulo.

Problemas de propagação são os conhecidos como equações de movimento e descrevem sistemas físicos em regimes não estacionários. Alguns exemplos físicos são a propagação de ondas em fluídos, propagação de compressões elásticas em sistemas de equilíbrio e propagação de calor. As condições auxiliares requeridas são condições iniciais e as condições de contorno.

Para cada tipo de problema existe uma classe de equações diferenciais associadas. Neste capítulo faremos uma breve discussão sobre cada uma destas classes.

2.2 Classificação das Equações Diferenciais Parciais

2.2.1 Classificação de Acordo com a Linearidade

Uma equação diferencial parcial pode ser linear, quase linear e não linear. A equação será linear se não houver produtos entre a variável dependente e ela mesma e nem entre ela e suas derivadas. No caso linear vale o princípio da superposição, isto é, qualquer combinação linear entre as soluções da equação também será uma solução. Devido a superposição linear podemos resolver qualquer tipo de problema ondulatório em um meio linear usando a transformada de Fourier [20]. Abaixo estão alguns exemplos de equações diferenciais lineares.

$$\partial_t \psi - \lambda \partial_x^2 \psi = 0, \quad (\text{Equação da Difusão}) \quad (2.1)$$

$$i\partial_t \psi + \frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \psi - V(x,t) \psi = 0, \quad (\text{Equação de Schrödinger}) \quad (2.2)$$

com λ real. A equação diferencial será considerada quase linear se ela for linear em sua derivada de ordem mais alta [32], que é o caso da Equação de Burger

$$\partial_t \psi + \psi \partial_x \psi = 0. \quad (2.3)$$

Caso uma PDE não seja nem linear nem quase linear então ela será não linear. A NLSE (1.1) é um exemplo deste tipo de equação.

2.2.2 Equações Diferenciais Parciais de Segunda Ordem

Considere a equação conhecida como Equação Geral das Equações Diferenciais Parciais Quase Lineares de Segunda Ordem

$$A\partial_x^2 \psi + B\partial_{xy}^2 \psi + C\partial_y^2 \psi + D\partial_x \psi + E\partial_y \psi + F\psi + G = 0 \quad (2.4)$$

A solução de uma equação diferencial de segunda ordem gerada pela expressão acima será uma superfície em um espaço tridimensional. O domínio será definido pelas variáveis x e y . Neste domínio haverá curvas que conectam as várias soluções de uma equação diferencial, conhecidas como curvas características. Através da Eq. (2.4), depois de algumas considerações, e depois de alguns cálculos é possível chegar à uma equação algébrica de segundo grau para $\frac{dy}{dx}$. As raízes da equação algébrica serão:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}. \quad (2.5)$$

Estas duas equações acima, isto é, (2.5) com os sinais de $+$ e $-$, são conhecidas como *equações características*. São equações diferenciais ordinárias representadas por um conjunto de características no plano ψ_x, ψ_y , conhecidas como *características hodógrafas* [33]. Deve-se ter cuidado para não confundir-se as características hodógrafas com a família de curvas características que citamos primeiro. Enquanto as características hodógrafas existem no plano ψ_x, ψ_y , as características que citamos anteriormente existem no plano xy e são soluções das equações características [34].

Dependendo do valor de $B^2 - 4AC$ as curvas características podem ser reais ou imaginárias. Caso sejam reais, as características no domínio da solução de uma equação diferencial parcial define uma região chamada de domínio de influência da equação diferencial. Na Fig. 2.1 temos o esboço das características de uma equação diferencial parcial arbitrária (curvas). O *domínio de influência* do ponto **A** é representado pela região sombreada inferior. As características que se encontram na fronteira da região são definidas pelas condições iniciais $\psi(x, 0)$. Qualquer alteração na solução em um determinado ponto deste domínio irá se propagar por ele através da característica em que este ponto estiver localizado, e irá alterar a solução da equação diferencial no ponto **A**. A *zona de dependência* é a região sombreada superior. Qualquer alteração na solução da equação diferencial no ponto **A** irá se propagar através das características e irá afetar a solução da equação diferencial nesta região.

A classificação das equações diferenciais parciais de segunda ordem são feitas de acordo com a

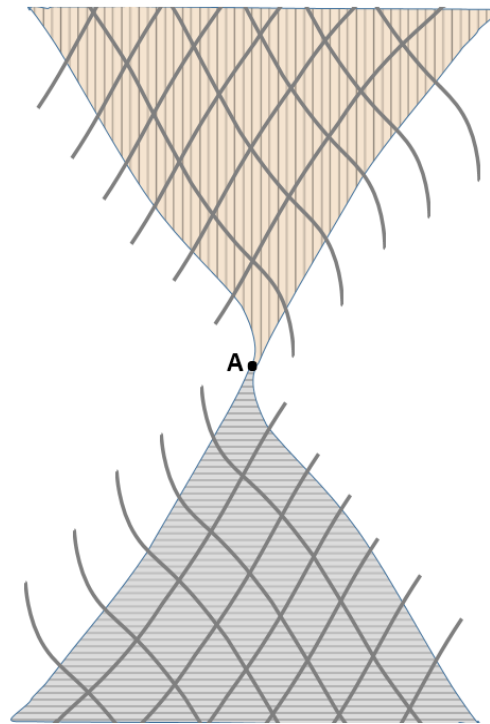


Figura 2.1: Domínio de influência (parte inferior da figura) e zona de dependência (parte superior) de uma equação diferencial arbitrária. As curvas mais escuras representam as características da equação. Qualquer alteração em um ponto do domínio de influência irá se propagar através de uma característica e irá influenciar o resultado da solução no ponto **A**. Qualquer alteração da solução no ponto **A** irá alterar todas as outras soluções que estão zona de dependência.

expressão $B^2 - 4AC$ tal que

$$B^2 - 4AC > 0, \quad (\text{Hiperbólica})$$

$$B^2 - 4AC = 0, \quad (\text{Parabólica})$$

$$B^2 - 4AC < 0. \quad (\text{Elíptica})$$

(2.6)

Os nomes destas equações vêm da analogia com a Equação Geral das Seções Cônicas da geometria analítica

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0 \quad (2.7)$$

que pode representar uma hipérbole, uma parábola ou uma elipse, dependendo se a relação $B^2 - 4AC$ é maior, igual ou menor do que zero.

2.2.3 Equações Diferenciais Parciais Hiperbólicas

As equações diferenciais hiperbólicas se encaixam no que se chama de problema de propagação. Um exemplo bem conhecido é a Equação de Onda de Segunda Ordem

$$\partial_x^2 \psi - \lambda \partial_t^2 \psi = 0. \quad (2.8)$$

Esta equação requer duas condições iniciais e duas condições de contorno. Podemos ver pela Eq. (2.5) que ela possui duas características reais conforme é mostrado no lado esquerdo da Fig. 2.2.

Por sua vez a Equação da Advecção, que é uma equação diferencial hiperbólica de primeira ordem

$$\partial_x \psi - \lambda \partial_t \psi = 0, \quad (2.9)$$

requer apenas uma condição inicial. Nesta equação, responsável por descrever a propagação ondulatória, λ representa a velocidade da propagação. Por ser de primeira ordem não obedece à regra de classificação (2.5). As curvas características para esta equação são mostradas na figura abaixo e a velocidade λ indica a inclinação em relação ao eixo x . Equações hiperbólicas possuem domínios abertos [35].

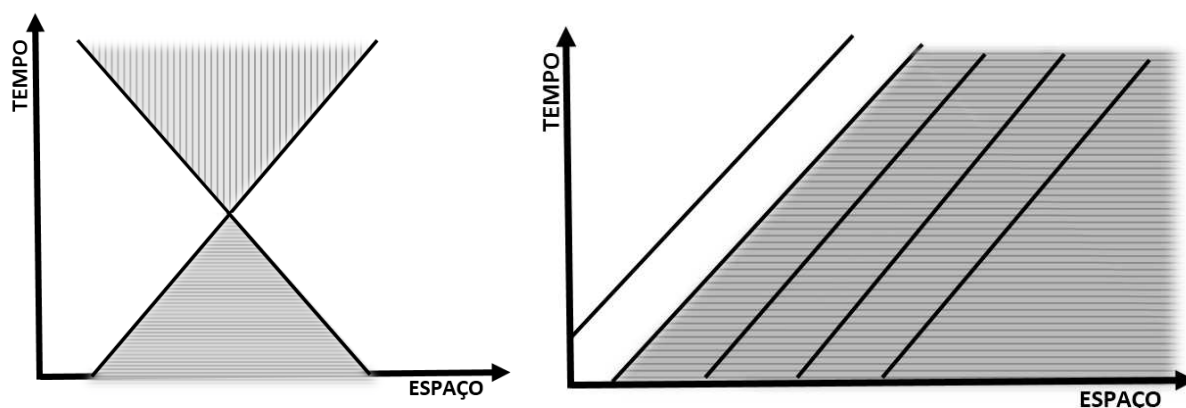


Figura 2.2: Na figura do lado esquerdo vemos o domínio de influência e a zona de dependência da Equação de Onda de Segunda Ordem (2.8). As duas linhas diagonais correspondem às equações $x(t) = x_0 \pm \sqrt{\lambda}t$ onde x_0 é a condição inicial. Desta forma esta região vai depender da escolha que fizermos para x_0 . A família de curvas do lado direito correspondem às características da Equação de Onda de Primeira Ordem (2.9) e são definidas de acordo com a equação $x(t) = x_0 + \lambda t$. Cada uma das curvas está associada à uma condição inicial x_0 .

2.2.4 Equações Diferenciais Parciais Parabólicas

As equações parabólicas se encaixam no que se chama de problemas de propagação. O exemplo mais conhecido é Equação da Difusão. Neste tipo de problema a descrição física completa pode ser dada por um par de condições de contorno e uma condição inicial. As condições de contorno podem ser de Neumann ($\psi = g_1$), de Dirichlet ($\frac{\partial \psi}{\partial n} = g_2$ onde $\frac{\partial}{\partial n}$ é a derivada normal) ou de Robin (a combinação linear entre as duas).

As equações diferenciais parabólicas possuem uma única característica real. Como a inclinação da característica em relação ao eixo x indica a velocidade em que a informação se propaga até um ponto \mathbf{A} , podemos dizer que neste tipo de problema a informação se propaga instantaneamente [36]. Na Ref. [29] Trefethen afirma: “ (...) por exemplo para $\partial_t \psi - \partial_x^2 \psi = 0$ ou qualquer outra equação diferencial parabólica em uma dimensão espacial, o domínio de dependência será todo o eixo x pois em uma equação parabólica, a informação viaja infinitamente rápido”.

O domínio da solução para uma equação diferencial parcial parabólica é um domínio aberto conforme é mostrado na figura abaixo.

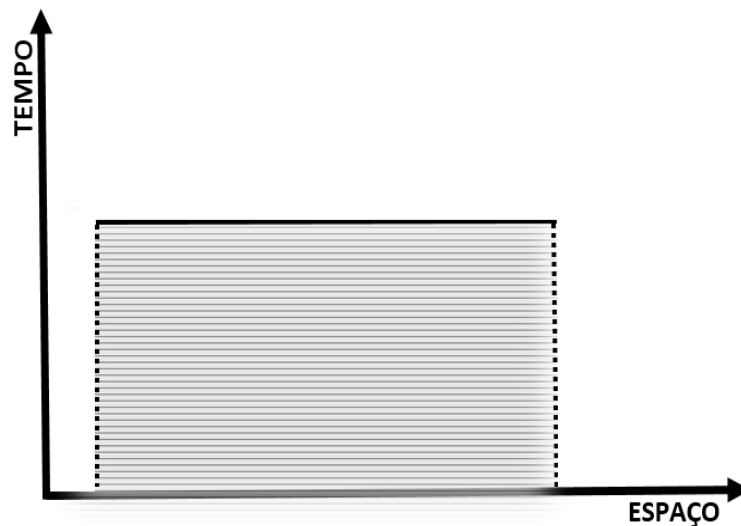


Figura 2.3: A linha horizontal corresponde à característica da equação diferencial. As linhas verticais tracejadas correspondem às condições de contorno.

2.2.5 Equações Diferenciais Parciais Elípticas

Este tipo de equação se encaixa nos problemas estacionários. Enquanto equações diferenciais parabólicas e hiperbólicas descrevem problemas de valores iniciais, equações diferenciais elípticas representam problemas de valores de contorno.

Suas soluções possuem o domínio fechado. Dado o domínio fechado, a solução da equação diferencial no contorno será a variável dependente, um gradiente normal da variável dependente ou a combinação linear de ambos.

As equações diferenciais parciais elípticas não possuem características reais. Desta forma não há regiões limitadas para o domínio de influência ou zona de dependência. Isto significa que a informação se propaga em todos os lugares e em todas as direções [37].

Exemplos bem conhecidos de equações elípticas são a Equação de Poisson e a Equação de Laplace

$$\begin{aligned}\partial_x^2 \psi + \partial_y^2 \psi &= 0, \\ \partial_x^2 \psi + \partial_y^2 \psi &= u(x, t).\end{aligned}\tag{2.10}$$

Há outros tipos de equações diferenciais parciais que são combinações entre equações diferenciais hiperbólicas, parabólicas e elípticas.

2.3 Problemas de Valor Inicial e de Contorno

Para uma descrição precisa de um problema físico é necessário que a representação matemática, isto é, a equação governante e as condições auxiliares (condições de contorno e condições iniciais) sejam bem postas [38]. No início do século XX o matemático francês Jacques Hadamard definiu um problema bem posto como sendo aquele que cumpre as três condições:

- (i) A existência da solução;
- (ii) A solução deve ser única;
- (iii) A solução depende continuamente dos dados fornecidos pelas condições auxiliares.

2.3.1 Problemas de Valores de Contorno

As condições de contorno, assim como as condições iniciais, são essenciais para se ter um modelo matemático que descreva corretamente um sistema físico, principalmente no que diz respeito à unicidade das soluções [33]. Na Ref. [38] encontramos o seguinte: “ *De uma forma geral, o fato das condições de contorno serem ignoradas, pode conduzir a resultados não físicos e o fato de serem superestimadas pode conduzir à não unicidade das soluções*”.

Por superestimadas entendemos que são as condições de contorno colocadas no lugar errado. Por exemplo, em meteorologia, quando a modelagem matemática for feita para estudar um modelo global de circulação atmosférica, as condições de contorno podem ser periódicas. Mas podemos também pegar somente uma parte deste modelo global para estudar um determinado fenômeno separadamente. Neste caso, segundo nossa interpretação, é essencial que as condições de contorno não sejam colocadas em regiões onde o fenômeno estudado ocorra com mais intensidade e sim nas regiões onde ele se atenua.

As condições de contorno mais conhecidas são:

- (i) Condições de Contorno de Neumann, $\psi(x, t) = f(x, t)$;
- (ii) Condições de Contorno de Diriclet, $\partial_x \psi(x, t) = \phi(x, t)$;
- (iii) Condições de Contorno de Robin que é formada pela combinação linear das duas anteriores;

As condições de contorno de uma equação diferencial também podem ser classificadas como homogêneas, se os valores de ψ forem iguais em todos os contornos, e não homogêneas caso ocorra o contrário [39].

2.3.2 Problemas de Valor Inicial e Problemas de Cauchy

As condições iniciais devem ser levadas em conta pelos mesmos motivos das condições de contorno. As equações diferenciais parciais conhecidas como problemas de valor inicial são equações cujo os valores das soluções em um determinado tempo são fornecidos. Como exemplo vamos tomar

a Equação da Difusão

$$\begin{aligned} \partial_t \psi - \lambda \partial_x^2 \psi &= 0, & \text{satisfazendo as condições} \\ \psi(x, 0) &= \psi_0(x) \text{ e } \partial_t \psi = \phi. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Em um problema de valor inicial não é essencial que os valores de ψ sejam atribuídos ao longo da linha $t = t_0$. Eles podem muito bem serem atribuídos ao longo de uma curva L_0 no plano $x - t$. Problemas deste tipo são chamados de Problemas de Cauchy.

Capítulo 3

Sólitons e a Equação de Schrödinger Não Linear

Sólitons são ondas solitárias que possuem a característica de manter sua forma durante a propagação em tempos muito longos. Além disso essas ondas exibem características do tipo partículas, isto é, elas permanecem intactas após múltiplas colisões.

Uma das primeiras observações de uma onda deste tipo ocorreu em 1844 por James Scott Russell. Na ocasião, conforme foi relatado por Russell, um barco estava sendo rebocado por dois cavalos através de um canal, e quando o barco parou subitamente um suave pulso de onda que havia se formado continuou a propagar-se com velocidade constante e sem mudar seu formato.

As observações de Russell permaneceram inexplicadas por um longo tempo até que em 1895 Diederik Korteweg e Gustav De Vries notaram que enquanto a dispersão faz a onda se alargar, efeitos não lineares fazem a onda se concentrar. O equilíbrio entre esses dois efeitos são responsáveis pelo fato da onda manter seu formato. Depois de uma análise teórica detalhada Korteweg e De Vries elaboraram a equação responsável para descrever a propagação desse tipo de onda:

$$\partial_t \psi + \partial_x^3 \psi + 6\psi \partial_x \psi = 0. \quad (3.1)$$

Essa equação é conhecida como Equação Korteweg-de Vries (KdV) e admite soluções do tipo:

$$\psi = \frac{1}{2}c \operatorname{sech} \frac{1}{2}\sqrt{c}(x - ct). \quad (3.2)$$

Hoje sabe-se que sólitons podem também formar-se em outros sistemas como fibras ópticas, plasmas, alguns sistemas biológicos, filmes magnéticos finos, etc.

3.1 Sólitos Ópticos

No contexto da óptica não linear os sólitos podem ser classificados como sólitos temporais e sólitos espaciais, dependendo se o confinamento irá ocorrer no tempo ou no espaço durante a propagação da onda. Sólitos temporais são pulsos ópticos que mantêm sua forma durante a propagação, enquanto sólitos espaciais são feixes auto guiados confinados nas direções transversais ortogonais à direção da propagação. Em ambos os casos o pulso de entrada se desenvolve em um sólito devido à uma mudança não linear no índice de refração. Essa mudança não linear é induzida pela intensidade do pulso. A dependência da intensidade do índice de refração conduz à um *self-focusing* espacial ou à um *self-phase modulation* (SPM) temporal. Um sólito espacial é formado quando o *self-focusing* espacial equilibra o alargamento natural induzido pela difração enquanto um sólito temporal é formado quando o SPM equilibra o alargamento natural induzido pela dispersão.

3.2 A Equação de Schrödinger Não Linear

Considere a Equação de Schrödinger não linear:

$$i\partial_t \psi + \beta_2 \partial_x^2 \psi + \gamma |\psi|^2 \psi = 0.$$

Aqui β_2 é um parâmetro real e representa a dispersão do pulso de onda com o passar do tempo. Neste fenômeno, conhecido como dispersão de velocidade de grupo (GVD, de *group velocity dispersion*), β_2 é chamado de parâmetro GVD. O parâmetro γ é o coeficiente de não linearidade e tem efeito de fazer o pulso encurtar (no caso auto focado) ou alargar (no caso auto defocado) à medida que o tempo passa. A formação de sólitos de luz em fibras ópticas é uma consequência do equilíbrio entre esses dois termos [20].

Uma propriedade importante da NLSE acima é que suas soluções possuem um número infinito de quantidades conservadas, o que é útil para que a precisão dos métodos numéricos aplicados a ela seja testado. As três primeiras quantidades conservadas são [16]:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx, \quad (3.3)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \partial_x \psi dx, \quad (3.4)$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* \partial_{xx} \psi + |\psi|^4) dx$$

ou

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(|\partial_x \psi|^2 - \frac{\gamma}{2} |\psi|^4 \right) dx, \quad (3.5)$$

conhecidas por norma, momento e energia, respectivamente. Em métodos numéricos é comum usar somente a norma e a energia para testar a precisão do método. I_1 é às vezes chamada de massa conservada ou potência conservada, porém no contexto dos métodos numéricos para sólitons ópticos é comum usar o termo norma conservada.

Há uma classe de NLSE que levam em conta termos com derivadas de ordem superior e que qualquer uma delas podem ser chamadas de Equação de Schrödinger Não Linear de Ordem Superior (HNLSE, de *High-Order Nonlinear Schrödinger Equation*), cuja forma geral é

$$\partial_t \psi - \sum_{l=1}^n i^{l-1} \beta_l \partial_x^l \psi - i\gamma |\psi|^2 \psi = 0, \quad (3.6)$$

em que $i = \sqrt{-1}$, β_l representa os coeficientes de dispersão de ordem l e, em certas situações físicas podem depender do tempo também. Elas são necessárias para descrever pulsos solitônicos ultracurtos, com largura $T_0 < 5ps$ [20].

Neste trabalho estudaremos a equação acima com $n = 4$ e $\beta_1 = \beta_3 = 0$, conhecida como Equação de Schrödinger Não Linear de Quarta Ordem:

$$i\partial_t \psi + \beta_2 \partial_x^2 \psi - \beta_4 \partial_x^4 \psi + \gamma |\psi|^2 \psi = 0. \quad (3.7)$$

Essa equação descreve pulsos solitônicos ultracurtos que são necessários em sistemas de transmissão ópticas com uma taxa de bits maior do que centenas de Mb/s, onde a influência da dispersão de quarta ordem na propagação do pulso não pode ser omitida [40]. A norma e energia conservadas para esta equação são [41]

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx, \quad (3.8)$$

e

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(|\partial_x \psi|^2 + |\partial_x^2 \psi|^2 - \frac{1}{2} |\psi|^2 \right) dx, \quad (3.9)$$

respectivamente.

Capítulo 4

Introdução aos Métodos Numéricos Aplicados à Equações Diferenciais

Soluções analíticas para equações não lineares não são fáceis de se encontrar. Além do mais, nem toda solução encontrada será estável com o tempo, perdendo assim sua utilidade para descrever um sóliton [20]. Isso levou ao desenvolvimento de variadas técnicas numéricas para serem aplicadas a estes tipos de equações diferenciais, que são utilizadas tanto para encontrar soluções aproximadas quanto para testar a estabilidade de soluções que são encontradas analiticamente. Já mencionamos antes que os métodos numéricos aplicados à NLSE se dividem em duas grandes áreas: os métodos de diferenças finitas e os métodos espectrais. Entre os métodos espectrais estão o método pseudo-espectral e o método split-step para o método de Fourier (SSFM), um método que tem sido bastante aprimorado nos últimos 20 anos e que é amplamente usado na comunidade física [16]. Este trabalho levará em conta somente o método de diferenças finitas SSFD e suas formas aprimoradas (Compact-SSFD), que será usado para separar as partes lineares e não lineares de dois tipos diferentes de NLSE, tal que cada parte possa ser resolvida separadamente. No nosso caso a parte não linear será resolvida exatamente e a linear será resolvida usando métodos de diferenças finitas.

4.1 Métodos de Diferenças Finitas para discretização de Equações Diferenciais

Considere a Equação da Difusão em uma dimensão

$$\partial_t \psi = \lambda \partial_x^2 \psi, \quad (4.1)$$

com λ real. Vamos supor que estejamos levando em conta um intervalo espacial XX e um intervalo temporal TT . Vamos supor também que o intervalo XX seja dividido em N_x intervalos de tamanho h e o intervalo TT seja dividido em N_t intervalos de tamanho k . Podemos então representar este espaço por um conjunto discreto de $N_x + 1$ e $N_t + 1$ pontos igualmente espaçados, tal que $N_x h = XX$ e $N_t k = TT$ formam uma rede bidimensional.

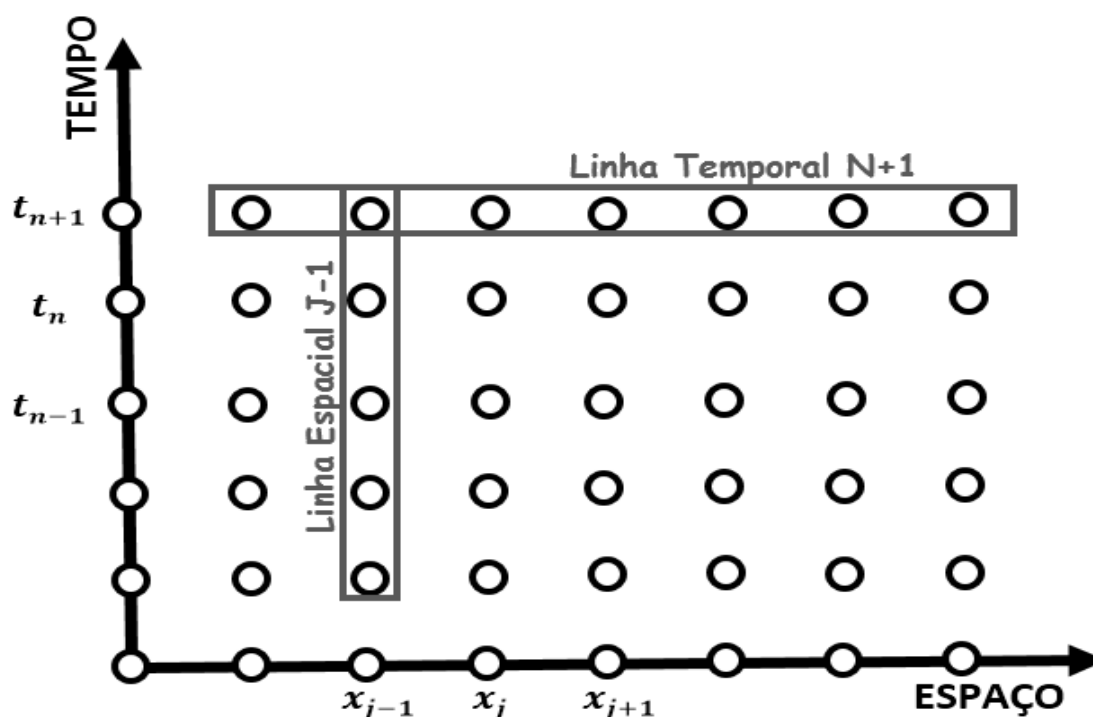


Figura 4.1: Domínio da equação diferencial discretizada. Na horizontal, o espaçamento entre dois pontos vale h enquanto na vertical o espaçamento vale k .

Usando o esquema de diferenças finitas *para frente no tempo, para frente no espaço* (FTFS de *forward-time forward-space*) teremos:

$$\frac{1}{k}(\psi^{j,n+1} - \psi^{j,n}) = \frac{\lambda}{h^2}(\psi^{j,n} - 2\psi^{j+1,n} + \psi^{j+2,n}), \quad (4.2)$$

em que foi usado $\psi^{j\pm p, n\pm q} \equiv \psi(x_j \pm ph, t_n \pm qk)$. Este tipo de equação é conhecida como *equação de diferenças finitas* ou *equação discretizada* da equação da difusão. Duas outras conhecidas formas de representar-se a discretização da Equação da Difusão são os esquemas *para frente no tempo, para trás no espaço* (FTBS de *forward-time backward-space*), e *para frente no tempo, centrado no espaço* (FTCS de *forward-time central-space*), que são escritos como

$$\frac{1}{k}(\psi^{j, n+1} - \psi^{j, n}) = \frac{\lambda}{h^2}(\psi^{j-2, n} - 2\psi^{j-1, n} + \psi^{j, n}), \quad (4.3)$$

$$\frac{1}{k}(\psi^{j, n+1} - \psi^{j, n}) = \frac{\lambda}{h^2}(\psi^{j-1, n} - 2\psi^{j, n} + \psi^{j+1, n}), \quad (4.4)$$

respectivamente. O esquema FTCS usa três soluções discretizadas no tempo n para obter uma solução discretizada no tempo $n + 1$ conforme é mostrado na Fig. 4.2

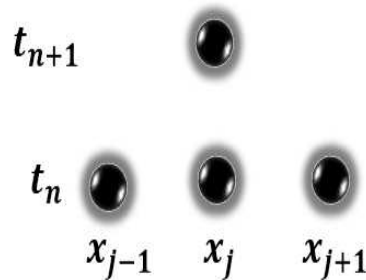


Figura 4.2: Pontos usados no esquema FTCS.

Como um processo de discretização de uma equação diferencial consiste em substituir as derivadas exatas por derivadas discretas, obviamente isto implica em um erro de discretização, que pode ser obtido tomando as expansões em Series de Taylor:

$$\psi^{j\pm p, n} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \partial_x^r \psi^{j, n} (\pm ph)^r, \quad (4.5)$$

$$\psi^{j, n\pm q} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \partial_t^s \psi^{j, n} (\pm qk)^s, \quad (4.6)$$

e

$$\psi^{j\pm p, n\pm q} = \sum_{r=0, s=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \partial_x^r \partial_t^s \psi^{j, n} (\pm ph)^r (\pm qk)^s \quad (4.7)$$

onde ∂_t^0 não tem nenhum efeito sobre ψ e o índice $n \pm q$ vale para $\pm qk$ enquanto $j \pm p$ vale para $\pm ph$. Como exemplo vamos obter Eq. (4.2), tomando primeiro a Eq. (4.6) com o índice $n + 1$

$$\psi^{j,n+1} = \psi^{j,n} + \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 + \frac{1}{3!} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^3 + \dots, \quad (4.8)$$

que se for truncada em $O(k^2)$, nos permite encontrar a equação abaixo que tem ordem de aproximação $O(k)$:

$$\partial_t \psi^{j,n} = \frac{1}{k} (\psi^{j,n+1} - \psi^{j,n}) + O(k). \quad (4.9)$$

Agora tomando (4.5) com $j + 2$

$$\begin{aligned} \psi^{j+2,n} &= \psi^{j,n} + 2\partial_x \psi^{j,n} h + \frac{4}{2!} \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \frac{8}{3!} \partial_x^3 \psi^{j,n} h^3 + \frac{16}{4!} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 \\ &+ \frac{32}{5!} \partial_x^5 \psi^{j,n} h^5 + \frac{64}{6!} \partial_x^6 \psi^{j,n} h^6 + \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

e depois com $j + 1$

$$\begin{aligned} \psi^{j+1,n} &= \psi^{j,n} + \partial_x \psi^{j,n} h + \frac{1}{2!} \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{3!} \partial_x^3 \psi^{j,n} h^3 + \frac{1}{4!} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 \\ &+ \frac{1}{5!} \partial_x^5 \psi^{j,n} h^5 + \frac{1}{6!} \partial_x^6 \psi^{j,n} h^6 \dots \end{aligned} \quad (4.11)$$

Multiplicando (4.11) por -2 e somando (4.10) obtemos

$$\partial_x^2 \psi^{j,n} = \frac{1}{h^2} (\psi^{j,n} - 2\psi^{j+1,n} + \psi^{j+2,n}) + O(h) \quad (4.12)$$

onde a truncação na expansão foi feita em $O(h^3)$ e depois de algumas manipulações simples obtemos a equação acima com aproximação $O(h)$. Substituindo (4.12) e (4.9) na Equação da Difusão observamos que a Equação FTFS (4.2) tem precisão de primeira ordem no tempo e no espaço.

Se usarmos expansão (4.5) com $j - 1$ e depois com $j - 2$ truncada em $O(h^3)$, combinando em seguida com a Eq. (4.9), podemos fazer o mesmo processo para verificar que a Eq. (4.3) também tem precisão de primeira ordem no tempo e no espaço.

Para verificarmos o erro da Eq. (4.4) tomamos (4.6) com $j - 1$ para obtermos a expansão,

$$\begin{aligned} \psi^{j-1,n} &= \psi^{j,n} - \partial_x \psi^{j,n} h + \frac{1}{2!} \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 - \frac{1}{3!} \partial_x^3 \psi^{j,n} h^3 + \frac{1}{4!} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 \\ &- \frac{1}{5!} \partial_x^5 \psi^{j,n} h^5 + \frac{1}{6!} \partial_x^6 \psi^{j,n} h^6 \dots \end{aligned} \quad (4.13)$$

Somando esta expansão com a expansão (4.11) e truncando $O(h^4)$ podemos perceber que (4.4) possui precisão de primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço.

O método Crank-Nicholson é uma versão aprimorada da Eq. (4.4) ganhando uma ordem de precisão a mais no tempo além da vantagem de podermos resolver um sistema de equações que pode ser representado por matrizes tridiagonais, facilmente invertíveis pelo *algoritmo de Thomas*. A equação de diferenças finitas para este método é

$$\frac{1}{k}(\psi^{j,n+1} - \psi^{j,n}) = \frac{\lambda}{2h^2}[(\psi^{j+1,n+1} - 2\psi^{j,n+1} + \psi^{j-1,n+1}) + (\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n})] \quad (4.14)$$

ou

$$-a\psi^{j+1,n+1} + (1+2a)\psi^{j,n+1} - a\psi^{j-1,n+1} = a\psi^{j+1,n} + (1-2a)\psi^{j,n} + a\psi^{j-1,n}, \quad (4.15)$$

onde $a = \frac{\lambda k}{2h^2}$. Este método toma a solução em três pontos na linha temporal n para obter a solução em três pontos da linha temporal $n+1$, conforme é mostrado na Fig. 4.3.

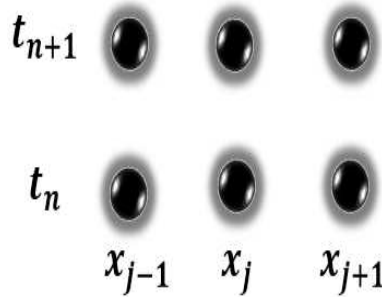


Figura 4.3: Pontos usados no esquema Crank-Nicholson.

Se considerarmos todos os pontos da malha teremos o sistema de equações

$$\begin{cases} -a\psi^{j+1,n+1} + (1+2a)\psi^{j,n+1} - a\psi^{j-1,n+1} = a\psi^{j+1,n} + (1-2a)\psi^{j,n} + a\psi^{j-1,n} \\ -a\psi^{j+2,n+1} + (1+2a)\psi^{j+1,n+1} - a\psi^{j,n+1} = a\psi^{j+2,n} + (1-2a)\psi^{j+1,n} + a\psi^{j,n} \\ -a\psi^{j+3,n+1} + (1+2a)\psi^{j+2,n+1} - a\psi^{j+1,n+1} = a\psi^{j+3,n} + (1-2a)\psi^{j+2,n} + a\psi^{j+1,n} \\ \dots \end{cases}$$

(4.16)

que escrito na forma matricial

Para estimar o erro deste método primeiro somamos a expansão (4.13) com (4.11) para obtermos

$$\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n} = \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 + \dots \quad (4.19)$$

Agora usamos a expansão (4.8) com $j \pm 1$ e $n + 1$ para obtermos

$$\begin{aligned} \psi^{j \pm 1, n+1} = & \psi^{j,n} \pm \partial_x \psi^{j,n} h + \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{2!} [\partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 \pm 2\partial_x \partial_t \psi^{j,n} h k + \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2] \\ & + \frac{1}{3!} [\pm \partial_x^3 \psi^{j,n} h^3 + 3\partial_x \partial_t \psi^{j,n} h^2 k \pm 3\partial_x \partial_t^2 \psi^{j,n} h k^2 + \partial_t^3 \psi^{j,n} k^3] \\ & + \frac{1}{4!} [\partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 \pm 4\partial_t \partial_x^3 \psi^{j,n} h^3 k + 6\partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} h^2 k^2 \pm \partial_x \partial_t^3 \psi^{j,n} h k^3 + \\ & \partial_t^4 \psi^{j,n} k^4] + \dots \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ao somarmos esta equação ($j + 1$) com ela mesma ($j - 1$) obtemos

$$\begin{aligned} \psi^{j+1,n+1} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n+1} = & 2\partial_t \psi^{j,n} k + \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 + \partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} h^2 k + \\ & + \frac{1}{3} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^3 + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 + \frac{1}{2} \partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} h^2 k^2 + \frac{1}{12} \partial_t^4 \psi^{j,n} k^4 + \dots \end{aligned} \quad (4.21)$$

Combinamos agora (4.19) com (4.21) para obtermos

$$\begin{aligned} \psi^{j+1,n+1} + \psi^{j-1,n+1} + \psi^{j+1,n} + \psi^{j-1,n} - 4\psi^{j,n} = & 2\partial_t \psi^{j,n} k + 2\partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \\ & \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 + \partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} h^2 k + \frac{1}{3} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^3 + \frac{1}{6} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 + \\ & \frac{1}{2} \partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} h^2 k^2 + \frac{1}{12} \partial_t^4 \psi^{j,n} k^4 + \dots \end{aligned} \quad (4.22)$$

Finalmente tomamos (4.8) multiplicada por (-2)

$$-2\psi^{j,n+1} + 2\psi^{j,n} = -2\partial_t \psi^{j,n} k - \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 - \frac{1}{3} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^3 - \frac{1}{12} \partial_t^4 \psi^{j,n} k^4 \dots = 0 \quad (4.23)$$

e somamos com (4.22), fazendo o truncamento de ordem $O(h^3)$ e $O(k^3)$. Ao dividirmos ambos os

lados por $\frac{1}{2h^2}$ teremos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2h^2}(\psi^{j+1,n+1} - 2\psi^{j,n+1} + \psi^{j-1,n+1} + \psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n}) &= \partial_x^2 \psi^{j,n} \\ &+ \frac{1}{2} \partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{4} \partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Somamos a equação acima com (4.8) truncada em $O(k^3)$ escrita na forma

$$-\frac{1}{k}(\psi^{j,n+1} - \psi^{j,n}) = -\partial_t \psi^{j,n} - \frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k - \frac{1}{3!} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^2 + O(k^3),$$

obtemos a equação para o método Crank-Nicholson mais o erro escrito na forma explícita

$$\begin{aligned} \frac{1}{2h^2}[(\psi^{j+1,n+1} - 2\psi^{j,n+1} + \psi^{j-1,n+1}) + (\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n})] - \frac{1}{k}[\psi^{j,n+1} \\ - \psi^{j,n}] &= (\partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n}) + O\left(\frac{1}{2} \partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{4} \partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k - \frac{1}{3!} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^2\right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

O motivo pelo qual escrevemos o erro na forma explícita é porque isto facilita quando formos analisar a consistência e a convergência do método numérico. Isto será feito nas seções seguintes. Podemos observar que o erro possui dois termos que contêm k e poderíamos nos equivocar ao dizer que o método é de primeira ordem no tempo, mas na verdade eles se anulam devido à Equação da Difusão, $\partial_t \psi = \partial_x^2 \psi$ e assim $\partial_t^2 \psi = \partial_x^2 \partial_t \psi$. Podemos simplesmente dizer que o Método Crank-Nicholson possui precisão de segunda ordem no espaço e segunda ordem no tempo.

É comum usar uma notação mais curta para a equação acima se definirmos um operador \mathbf{F} , chamado de operador discretização, tal que, se aplicado à função ψ leva à forma discretizada da equação diferencial:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\psi(x,t) - (\partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n}) &= O\left(\frac{1}{2} \partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{4} \partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k - \frac{1}{3!} \partial_t^3 \psi^{j,n} k^2\right) \end{aligned} \quad (4.26)$$

isto é, a equação discretizada menos a equação exata é igual ao erro.

Usando séries de Taylor podemos obter métodos numéricos mais precisos dos que foram feitos até agora para aproximar equações diferenciais. O mecanismo básico para isso é conseguir de alguma forma eliminar o termo da série de Taylor, onde iríamos fazer o truncamento. Feito isso, fazemos o truncamento no próximo termo (de ordem mais alta), obtendo assim melhor precisão numérica. Vamos por exemplo considerar a relação (4.19). Ela nos leva a uma derivada segunda de ordem $O(h^2)$ se fizermos o truncamento no termo $\frac{1}{12}\partial_x^4\psi^{j,n}h^4$. Se conseguirmos eliminar este termo podemos fazer o truncamento no próximo termo da expansão $\frac{1}{360}\partial_x^6\psi^{j,n}h^6$, e assim obter uma derivada segunda de ordem $O(h^4)$. O procedimento para isso é o seguinte: vamos usar a expansão (4.6) com $j+2$ e depois com $j-2$, e logo em seguida somar as duas para obtermos

$$\psi^{j+2,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-2,n} = 4\partial_x^2\psi^{j,n}h^2 + \frac{4}{3}\partial_x^4\psi^{j,n}h^4 + \frac{8}{45}\partial_x^6\psi^{j,n}h^6 + \dots \quad (4.27)$$

Vamos tomar agora a mesma expansão (4.6), porém com $j+1$ e $j-1$, e fazer o mesmo processo para obtermos

$$\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n} = \partial_x^2\psi^{j,n}h^2 + \frac{1}{12}\partial_x^4\psi^{j,n}h^4 + \frac{1}{360}\partial_x^6\psi^{j,n}h^6 \dots \quad (4.28)$$

Ao multiplicarmos a Eq. (4.28) por 16 e subtraírmos (4.27) encontramos uma aproximação melhorada para a derivada segunda:

$$\partial_x^2\psi^{j,n} = \frac{1}{12h^2}(-\psi^{j-2,n} + 16\psi^{j-1,n} - 30\psi^{j,n} + 16\psi^{j+1,n} - \psi^{j+2,n}) + O(h^4). \quad (4.29)$$

Esta equação, embora tenha uma ordem de aproximação espacial melhor, aumenta a quantidade de pontos a ser utilizado. Ao invés de usarmos três pontos em cada passo no tempo, teremos que usar cinco pontos, o que aumenta também o tempo computacional, além de não termos mais uma matriz tridiagonal e sim uma matriz pentadiagonal, que obviamente é mais difícil de se inverter pelo algoritmo de Thomas.

Há uma outra forma de aumentarmos a precisão espacial da discretização da Equação da Difusão mantendo a mesma quantidade de pontos na rede. Para isso escrevemos o termo $\frac{1}{12}\partial_x^4\psi^{j,n}h^4$ na Eq.

Podemos observar que, assim como no método de Crank-Nicholson temos novamente matrizes tridiagonais indicando que os dois métodos terão o mesmo custo computacional.

Podemos usar o mesmo procedimento usado no método Crank-Nicholson para encontrarmos a forma explícita do erro:

$$\mathbf{F}\psi(x,t) - [\partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n}] = O\left\{ \left[\left(\frac{s}{24} - \frac{i\lambda s^2}{4} \right) \partial_x^2 \partial_t^2 \psi(x,t) + \left(\frac{1}{144} - \frac{i\lambda s}{24} \right) \partial_x^3 \partial_t \psi(x,t) - \frac{i\lambda}{360} \partial_x^6 \right] h^4 + \left[\frac{1}{6} \partial_t^3 \psi(x,t) \right] k^2 \right\} + O(k^4 + h^6), \quad (4.34)$$

onde $s = \frac{k}{h^2}$.

Este método *compact* pode ser obtido de uma outra forma, onde a própria Equação da Difusão é usada para eliminar o termo $\frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4$ na Eq. (4.28). Vamos novamente escrevê-lo como

$$\frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 = \frac{1}{12} \partial_x^2 \partial_x^2 \psi^{j,n} h^4. \quad (4.35)$$

Tomando a Equação da Difusão na forma (4.1) $\frac{1}{\lambda} \partial_t \psi = \partial_x^2 \psi$, substituímos esta derivada segunda na Eq. (4.35) e poderemos assim escrever a Eq. (4.28) na forma

$$\begin{aligned} \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 &= \psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n} - \frac{1}{12\lambda} \partial_t \partial_x^2 \psi^{j,n} h^4 + O(h^6) \\ &= \psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n} - \frac{1}{12\lambda} \partial_t \left[\frac{1}{h^2} (\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n}) + O(h^2) \right] h^4 + O(h^6). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Se substituirmos esta derivada segunda novamente na Equação da Difusão teremos novamente a Eq. (4.32).

É possível demonstrar que o método de Crank-Nicholson é uma espécie de método compact, só que para a derivada temporal. Podemos tomar a Eq. (4.8). Ao invés de truncarmos em $O(k^2)$ truncamos em $O(k^3)$

$$\psi^{j,n+1} = \psi^{j,n} + \partial_t \psi^{j,n} k + \frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2 + O(k^3) + \dots \quad (4.37)$$

e tentamos eliminar o termo $\frac{1}{2!} \partial_t^2 \psi^{j,n} k^2$. Assim como no método de Numerov, há duas formas de eliminarmos este termo, ou usando a Equação da Difusão ou usando séries de Taylor. Ao fazermos

esta substituição teremos a equação

$$\frac{d}{dt} \frac{\psi^{n+1} + \psi^n}{2} = \frac{d}{dt} \psi^n + O(k^2) \quad (4.38)$$

onde os índices j 's foram omitidos. Agora é só substituirmos ψ por $\frac{\psi^{n+1} + \psi^n}{2}$ na Equação da Difusão para obtermos a Eq. (4.14).

4.2 Análises de Estabilidade

Vamos considerar o método Crank-Nicholson escrito na forma (4.18). Podemos observar que cada vez que formos resolver este sistema de equações estaremos usando um conjunto de soluções previamente conhecidas no tempo n para encontrarmos um outro conjunto de soluções no tempo $n + 1$, depois em $n + 2$ e assim por diante. Sabemos que todo processo de discretização gera um erro. Ao fazermos a simulação numérica esse erro pode se acumular à medida em que obtemos soluções em tempos mais avançados. Este erro pode crescer exponencialmente fazendo com que o método seja inútil. Caso isto aconteça dizemos que o método é instável. O erro pode também oscilar dentro de uma faixa bem definida. Neste caso dizemos que o método é estável. Às vezes um método pode ser estável sob determinadas condições e às vezes ele será estável independente de qualquer condição. Neste último caso dizemos que o método é incondicionalmente estável.

Há diversas definições sobre o que é estabilidade. A seguinte se encontra na Ref. [31]: *Um método numérico que descreve um sistema físico que dependa das condições de contorno homogêneas em uma malha fixa será dito instável se existem condições iniciais para as quais a solução numérica se torna ilimitada para tempos muito longos enquanto a solução analítica permanece limitada*³.

Há dois métodos conhecidos para se fazer análises de estabilidade, o *Método de Fourier* e o *Método Matricial*, sendo que este último tem a vantagem de podermos incluir as condições de contorno.

³Uma função limitada é uma função que possui a imagem bem definida, isto é, em nenhum ponto ela vai para $\pm\infty$.

4.2.1 O Método de Fourier

O método de Fourier para análise de estabilidade, atribuído à Von Neumann, consiste em tomarmos o conjunto de soluções discretizadas para $\psi(x, t)$ em uma única linha temporal da malha, digamos $t_0 = 0$, que aqui vamos denotar por $\vec{\psi}(X, 0)$, e analisar qual a relação entre este conjunto de soluções e o conjunto de soluções $\vec{\psi}(X, t_1)$, na próxima linha temporal [31, 44]. Para facilitar mais ainda, podemos tomar somente uma entrada do vetor $\vec{\psi}(X, t_n)$ e fazermos a análise considerando que o resultado valerá para todas as outras entradas. Esta entrada seria uma solução $\psi(x_j, t_n)$ em um ponto específico da linha temporal discretizada. Neste tipo de análise supõe-se que a taxa de crescimento do erro de $\vec{\psi}(X, t_0)$ para $\vec{\psi}(X, t_1)$ será a mesma de $\vec{\psi}(X, t_1)$ para $\vec{\psi}(X, t_2)$ e assim sucessivamente. Sendo assim, para analisarmos como o erro produzido vai se comportar para longos tempos, primeiro tentamos entender como um erro existente em uma entrada do vetor da linha temporal inicial $\vec{\psi}(X, t_0)$ irá aumentar ou diminuir quando obtermos o vetor $\vec{\psi}(X, t_1)$ na próxima linha temporal. Se supormos que as soluções possam ser separadas em partes espaciais e temporais fazendo $\psi(x_j, t_n) = \phi_1(x_j)\phi_2(t_n)$, expandimos então a parte espacial em séries de fourier finitas

$$\phi_1(x_j) = \sum_m e^{i\beta_m x_j} \quad (4.39)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, o coeficiente $\beta > 0$ é real. Primeiro tentamos procurar soluções analíticas da equação que se reduzam à $\sum_m e^{i\beta_m x_j}$ quando $t = 0$ [44, 45]. Tal solução é

$$\psi(x_j, t_n) = \sum_m e^{i\beta_m x_j} e^{\omega t_n} \quad (4.40)$$

ou, na notação para diferenças finitas e de uma forma mais geral

$$\psi^{j\pm p, n\pm q} = \sum_m e^{i\beta_m(x_j\pm ph)} e^{\omega(t_n\pm qk)}, \quad (4.41)$$

onde ω geralmente é complexo [44, 45]. Pelo fato desta equação ser uma combinação linear, podemos levar em conta somente um termo $e^{i\beta_m(x_j\pm ph)} e^{\omega(t_n\pm qk)}$ do somatório. Agora basta substituírmos a Eq. (4.41) na equação do método de diferenças finitas em questão.

Para isso vamos primeiro definir ε como sendo o erro, ψ_E como sendo a solução exata e ψ_A

como sendo a solução aproximada para ψ^4 , então podemos considerar que $\varepsilon = \psi_E - \psi_A$.

Vamos aplicar em três exemplos. O primeiro é o Método CTCS (centrado no tempo, centrado no espaço) para Equação de Onda $\partial_x^2 \psi - \lambda \partial_t^2 \psi = 0$. Quando usamos o CTCS teremos

$$\frac{1}{k^2} [\psi^{j,n+1} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j,n-1}] = \frac{\lambda}{h^2} [\psi^{j-1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j+1,n}], \quad (4.42)$$

se $\psi = \psi_A$ então

$$\begin{aligned} & \frac{1}{k^2} [\psi_E^{j,n+1} - 2\psi_E^{j,n} + \psi_E^{j,n-1}] - \frac{1}{k^2} [\varepsilon^{j,n+1} - 2\varepsilon^{j,n} + \varepsilon^{j,n-1}] \\ &= \frac{\lambda}{h^2} [\psi_E^{j-1,n} - 2\psi_E^{j,n} + \psi_E^{j+1,n}] - \frac{\lambda}{h^2} [\varepsilon^{j-1,n} - 2\varepsilon^{j,n} + \varepsilon^{j+1,n}]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Devido à combinação linear, podemos tratar separadamente a equação de diferenças finitas para o erro:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{k^2} [\varepsilon^{j,n+1} - 2\varepsilon^{j,n} + \varepsilon^{j,n-1}] \\ &= \frac{\lambda}{h^2} [\varepsilon^{j-1,n} - 2\varepsilon^{j,n} + \varepsilon^{j+1,n}], \end{aligned} \quad (4.44)$$

significando que o método numérico também é aplicado ao erro de arredondamento. Teremos assim uma equação similar à (4.41) para ele

$$\varepsilon^{j\pm p, n\pm q} = \sum_m e^{i\beta_m(x_j\pm ph)} e^{\omega(t_n\pm qk)}. \quad (4.45)$$

Substituindo este resultado na equação teremos

$$e^{\omega(t_n+k)} = 2ae^{\omega t_n} [-1 + \cos(\beta_m h)] + 2e^{\omega t_n} - e^{\omega(t_n-k)} \quad (4.46)$$

onde $a = \frac{\lambda k^2}{h^2}$. Ao multiplicarmos a equação acima por $e^{-\omega t_n}$ nos dá

$$\frac{e^{\omega(t_n+k)}}{e^{\omega t_n}} = 2a[-1 + \cos(\beta_m h)] + 2 - e^{-\omega k}. \quad (4.47)$$

A divisão $\frac{e^{\omega(t_n+k)}}{e^{\omega t_n}}$ é definida como sendo o *fator de amplificação* $g(\beta)$ e nos indica o aumento do erro quando vamos de $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_0)$ para $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_1)$. Um método numérico será estável se $|g(\beta)|^2 \equiv$

⁴Às vezes durante a simulação computacional usamos como condição inicial a própria solução exata ψ_E , mas mesmo assim erros serão introduzidos devido ao arredondamento feito pelo próprio computador. Estes erros são chamados *erros de arredondamento* e não dever ser confundidos com os *erros de truncamento* das séries de Taylor.

$|e^{\omega k}|^2 \leq 1$, e instável caso ocorra o contrário. Pode-se chegar à conclusão que o método acima será estável ⁵ desde que a condição

$$\frac{|\lambda|k}{h} \leq 1 \quad (4.48)$$

seja obedecida. Esta condição é conhecida como *condição de Courant-Friedrichs-Löwy* ou *condição CFL* e o número $\frac{|\lambda|k}{h} \equiv C$ é conhecido como *Número de Courant*. O significado da condição CFL é melhor entendido se olharmos para a Fig. 4.4.

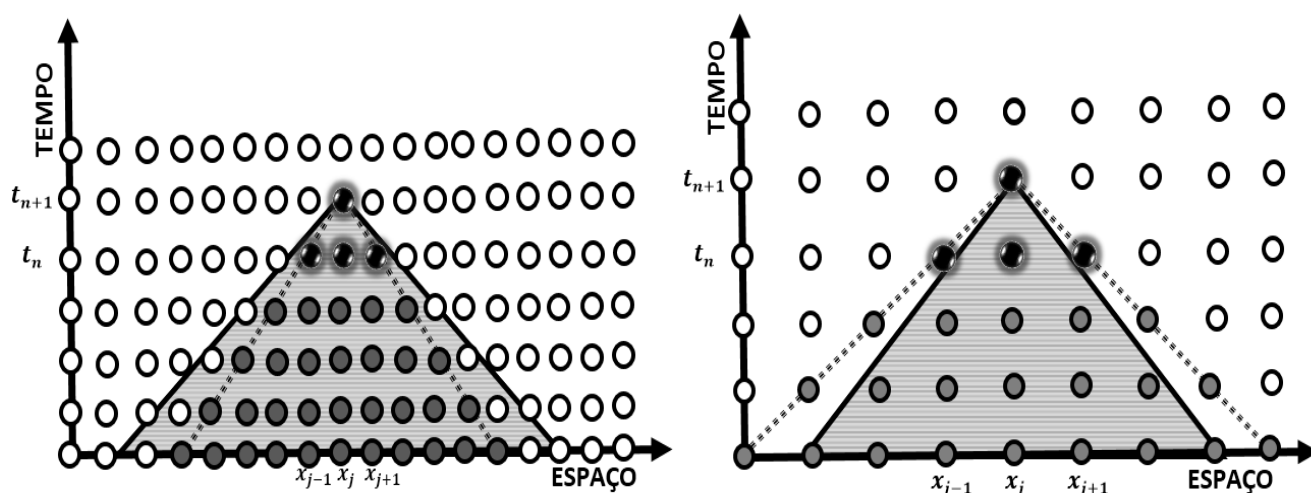


Figura 4.4: Na figura do lado esquerdo a Condição de Courant não é obedecida. Isto significa que o método não leva em conta alguns valores de ψ que são essenciais para a solução em tempos mais avançados. O problema pode ser resolvido se aumentarmos o tamanho de h ou diminuirmos o tamanho de k (lado direito).

Os pontos cinzentos representam o domínio de influência numérico enquanto a área sombreada representa o domínio de influência da equação diferencial. As linhas tracejadas representam as características do método numérico. Os pontos escuros nos indicam quais pontos o método usa no tempo n para obter soluções no tempo $n + 1$. Na figura do lado esquerdo podemos ver que o domínio de influência numérico está dentro do domínio de influência da equação diferencial. Isto implica que para obter a solução no ponto \mathbf{P} o método não está levando em conta todos os pontos necessários do domínio de influência da solução analítica. Isso pode levar à soluções que são instáveis! Para reforçar esta afirmativa veja a interpretação dada por Lax [46]: “ *Uma das observações seminais*

⁵Não se chega à esta conclusão de forma trivial. Para este método especificamente, ao invés de analisar se $|e^{\omega k}|^2 \leq 1$, definimos primeiro $\frac{e^{\omega k} + e^{-\omega k}}{2}$ como sendo a média de $e^{\omega k}$. A análise então será feita verificando se o módulo desta média será ≤ 1 .

relatadas no paper de Courant-Friedrichs-Lewy em 1928 foi que para que soluções da equação de diferenças finitas convirjam para as soluções da equação diferencial parcial, o método numérico deve usar toda a informação disponível nos dados iniciais que influenciam a solução”.⁶ Olhando para a Fig. 4.4 ou para a Eq. (4.48) podemos ver que o problema da estabilidade pode ser resolvido se aumentarmos o tamanho de h ou diminuirmos o tamanho de k .

Geralmente na literatura a Condição de Courant é enunciada da seguinte forma:

Condição CFL : O domínio numérico deve limitar, ou conter, o domínio de dependência do problema .

Conforme vimos no Cap. 2, existe uma relação entre as características de uma equação diferencial e a velocidade de propagação da informação no sistema físico que ela representa. Pode acontecer de a velocidade do fenômeno que ocorre na simulação computacional h/k seja menor do que a velocidade λ do sistema físico que ele quer representar (veja que no gráfico do lado esquerdo da Fig. 4.4 a característica numérica é menos incluída na direção do eixo x do que a característica da equação diferencial). Por isso às vezes a condição de Courant é enunciada da seguinte forma: “A velocidade do método numérico deve ser maior do que a velocidade do sistema físico que ele representa.”

Há três observações importantes a se fazer sobre a condição CFL [36]. A primeira é que, embora seja uma condição necessária, não é suficiente. A segunda é que ela leva em conta somente problemas ondulatórios. A terceira é que ela não diz nada à respeito da precisão do método numérico.

O segundo exemplo é o método FTCS aplicado à Equação da Difusão. Ao substituírmos (4.39) em (4.2) teremos, depois de alguns cálculos,

$$\frac{e^{\omega(t_n+k)}}{e^{\omega t_n}} \equiv g = 1 - 4a \sin^2 \left(\frac{\beta h}{2} \right) \quad (4.49)$$

onde $a = \frac{|\lambda|k}{h^2}$. A condição de Courant será

$$\frac{2|\lambda|k}{h^2} \leq 1. \quad (4.50)$$

⁶Veja que Lax fala em convergência, não em estabilidade. Nas próximas seções veremos que estes dois conceitos estão relacionados.

Podemos recorrer à Fig. 4.5 para entender melhor este resultado. O domínio numérico só será igual

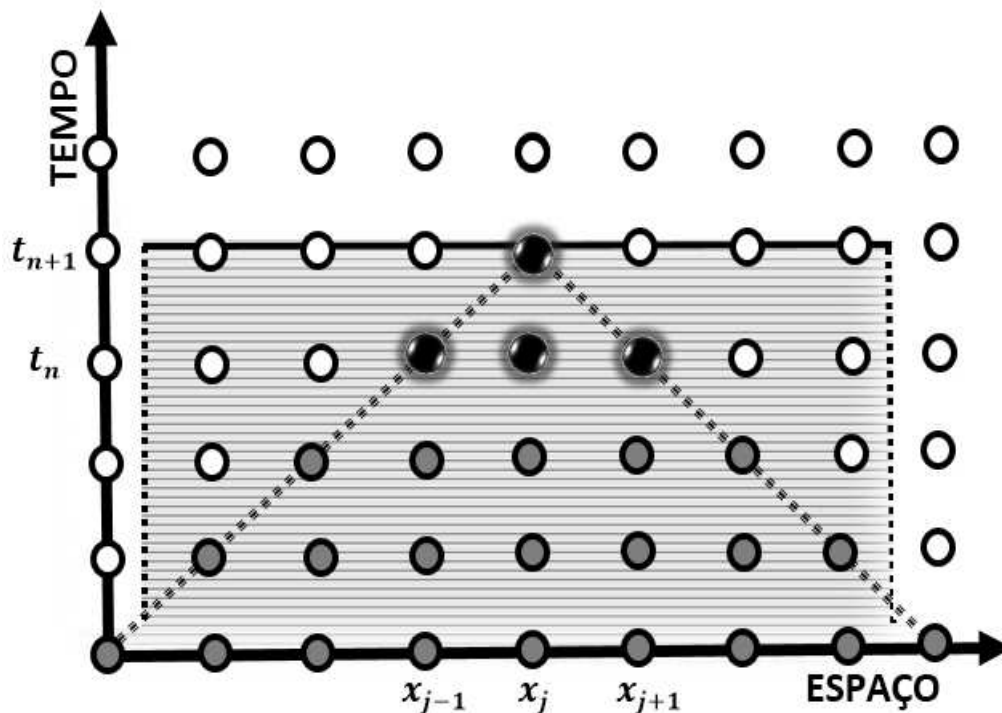


Figura 4.5: Quando o Método FTCS é aplicado à Equação da Difusão o domínio numérico só será igual ao domínio da equação diferencial se tomarmos k muito pequeno e h muito grande..

ao domínio da equação diferencial se tomarmos k muito pequeno e h muito grande. Desta forma dizemos que este método para a Equação da Difusão não é apropriado.

Por último vamos analisar o método Cranck-Nicholson aplicado à Equação da Difusão. Quando substituirmos $e^{i\beta_m(x_j \pm ph)} e^{\omega(t_n \pm qk)}$ na Eq. (4.14) obteremos depois de alguns cálculos,

$$\frac{e^{\omega(t_n+k)}}{e^{\omega t_n}} = \frac{1 - 2a \sin\left(\frac{\beta h}{2}\right)}{1 + 2a \sin\left(\frac{\beta h}{2}\right)}. \quad (4.51)$$

Podemos ver que este método será estável independente dos valores escolhidos para k e h , isto é, ele é incondicionalmente estável. Olhando para a Fig. 4.6 entendemos melhor o porquê. O domínio de influência da equação diferencial neste caso coincide com o domínio de influência numérico.

É importante fazermos três considerações sobre o método de Fourier [44]:

- (i) O método se aplica rigorosamente somente se os coeficientes da equação de diferenças finitas forem constante;

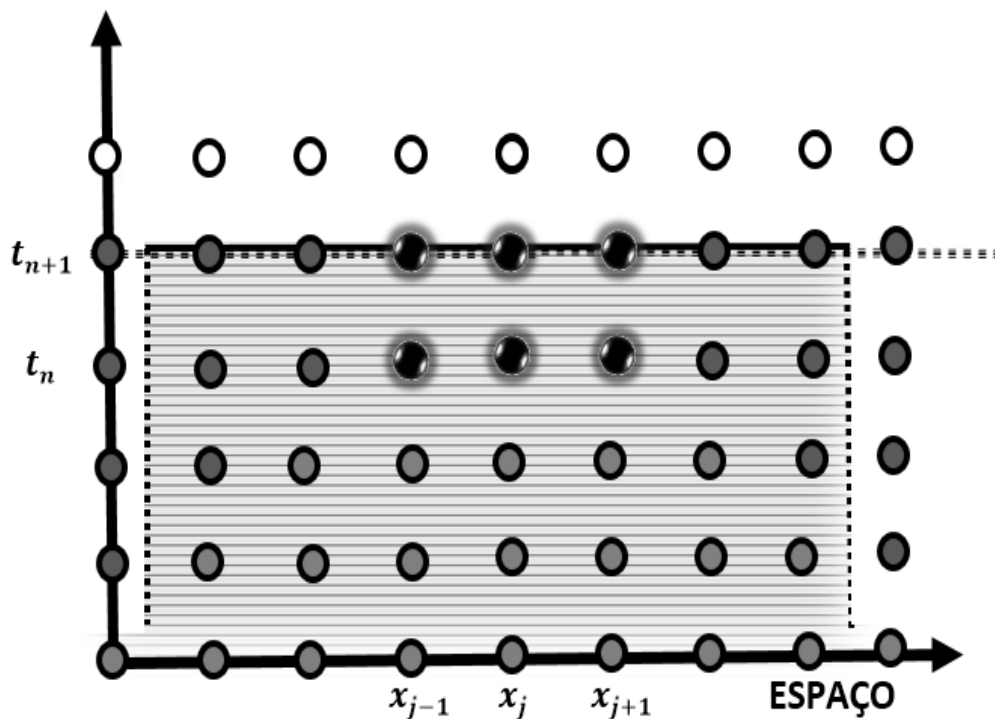


Figura 4.6: No método Crank-Nicholson a característica numérica coincide com a característica da equação diferencial.

- (ii) Para um método de diferença finita de dois níveis (que envolvem duas linhas temporais, n e $n + 1$ por exemplo) com uma variável dependente e um número qualquer de variáveis independentes a condição para a estabilidade é necessária e suficiente, caso contrário, é somente necessária;
- (iii) Esta condição ignora as condições de contorno ⁷, que também podem influenciar a estabilidade.

A exigência de condições de contornos periódicas para o método de Fourier está muito bem explicada na Ref. [47]: “Dada uma equação diferencial cuja as condições de contorno não sejam periódicas, se tentarmos resolvê-la analiticamente usando séries de Fourier, as soluções obtidas não satisfarão as condições de contorno. A razão disso é que séries de Fourier podem representar somente funções periódicas. Se a extensão periódica de uma função não é contínua, a série de Fourier convergirá para a média dos limites laterais tomados do lado esquerdo e direito do ponto de

⁷ Geralmente quando este método é aplicado as condições de contorno são ignoradas e isto é feito admitindo-se condições de contorno periódicas [45]. Na Ref. [29] Trefethen reforça esta afirmativa: “...neste capítulo vamos admitir que não há condições de contorno. Isto significa que ou elas estão no infinito ou elas são periódicas”.

descontinuidade. Este é um fenômeno que acontece quando um problema que tem as condições de contorno erradas é resolvido usando-se séries de Fourier(...) Acontece exatamente a mesma coisa quando você resolve uma equação de diferenças finitas através de séries de Fourier(...) Consequentemente qualquer análise de estabilidade que for feita usando modos de Fourier não dará nenhuma informação relacionada às condições de contorno.”

4.2.2 O Método de Estabilidade Matricial

O método de Estabilidade Matricial tem a vantagem de incluir as condições de contorno. Como exemplo vamos supor que o sistema de equações (4.1) seja usado para simular um sistema físico com condições de contorno em $x = 0$ e $x = 1$. Dividindo o intervalo XX em N_x partes iguais teremos $N_x + 1$ pontos em cada linha temporal de nossa malha espacial. Ao representarmos o sistema na forma matricial (4.17), caso as condições de contorno determinem que as soluções devam ser zero nas extremidades então $\psi^{1,n} = \psi^{1,n+1} = \psi^{N_x+1,n} = \psi^{N_x+1,n+1} = 0$, e podemos reduzir a dimensão da matriz tal que simulação computacional será feita somente no interior da malha sem levar em conta as extremidades e assim sem correr o risco de gerar contornos diferentes dos inicialmente estabelecidos. A análise de estabilidade será feita então para identificar instabilidades somente no método para o interior da malha. Caso as condições de contorno sejam diferente de zero, digamos uma constante c , então será usada uma matriz $(N_x + 1) \times (N_x + 1)$, e um vetor que represente as condições de contorno será adicionado à Eq. (4.17).

Vamos considerar novamente a Eq. (4.17): $\mathbf{A} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{B} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$. Devido ao fato de \mathbf{A} possuir inversa⁸ podemos escrever

$$\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{P} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n), \quad (4.52)$$

onde $\mathbf{P} \equiv \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$. Podemos ver que \mathbf{P} é semelhante a um operador translação discreto que leva um vetor ψ na posição n à posição $n + 1$. Então se inicialmente tivermos um vetor no tempo inicial

⁸Se uma matriz tridiagonal \mathbf{A} é *estritamente diagonalmente dominante*, então ela possui inversa. Ver **Teorema 2.1** da Ref. [36].

$\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_0)$ e aplicarmos a ele o operador translação \mathbf{P} $n + 1$ vezes teremos

$$\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{P}^{n+1} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t_0). \quad (4.53)$$

A equação de autovalor para \mathbf{P} é $\mathbf{P}\hat{v}_j = \mu_j \hat{v}_j$ onde μ_j é o j -ésimo autovalor e \hat{v}_j é o j -ésimo autovetor. Se para o vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n) \equiv (\psi^{1,n}, \psi^{2,n} \dots \psi^{N_x,n})^T$ houver um erro $\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_n) \equiv (\epsilon^{1,n}, \epsilon^{2,n} \dots \epsilon^{N_x,n})^T$ associado, haverá também um erro associado ao vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1})$, isto é:

$$\mathbf{P}[\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n) + \vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_n)] = [\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) + \vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_{n+1})]. \quad (4.54)$$

Se \mathbf{P} faz uma translação nos vetores erro, então um vetor erro pode ser escrito como uma combinação linear dos autovetores de \mathbf{P} . Por exemplo, o vetor erro $\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_1)$ associado ao primeiro passo no tempo $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_1)$ pode ser escrito como

$$\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_1) = \sum_{j=2}^{N_x} \alpha_j \mu_j \hat{v}_j \quad (4.55)$$

onde α é o coeficiente de expansão. Ao aplicarmos \mathbf{P} sucessivamente teremos

$$\mathbf{P}^n \vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_1) = \sum_{j=2}^{N_x} \alpha_j \mu_j^{n+1} \hat{v}_j. \quad (4.56)$$

O erro não irá crescer se quando tomarmos $n \rightarrow \infty$, este resultado permanecer finito, isto é, se

$$|\mu_j| \leq 1 \quad (4.57)$$

para todo j , garantindo assim a estabilidade do método. É óbvio que basta olharmos para o autovalor máximo de \mathbf{P}

$$\rho(\mathbf{P}) = \max_j \mu_j \quad (4.58)$$

onde $\rho(\mathbf{P})$ é definido como sendo o *raio espectral* de \mathbf{P} . Vemos então que todo o nosso problema para a análise de estabilidade se resume em encontrar o autovalor máximo da matriz \mathbf{P} .

Como exemplo vamos fazer a análise de estabilidade matricial de dois métodos. O primeiro é o Método de Diferenças Finitas Compacto de Quarta Ordem. A equação matricial é $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{P}\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$ onde $\mathbf{P} = [\mathbf{C} - ia'\mathbf{D}]^{-1}[\mathbf{C} + ia'\mathbf{D}]$. Se $\mu_{\mathbf{C}j}$, com $j = 2, 3, \dots, N_x$, representam os autovalores da matriz \mathbf{C} , e $\mu_{\mathbf{D}j}$ representam os autovalores da matriz \mathbf{D} , então os autovalores da matriz $\mathbf{C} +$

$ia'\mathbf{D}$ serão $\mu_{Cj} + ia'\mu_{Dj}$ e os autovalores da matriz $[\mathbf{C} - ia'\mathbf{D}]^{-1}$ serão $[\mu_{Cj} - ia'\mu_{Dj}]^{-1}$. Então os autovalores da matriz \mathbf{P} são

$$\mu_{Pj} = \frac{\mu_{Cj} + ia'\mu_{Dj}}{\mu_{Cj} - ia'\mu_{Dj}}, \quad (4.59)$$

com o qual facilmente verificamos que $|\mu_{Pj}|^2 = 1$ para qualquer j , mostrando assim que o método é incondicionalmente estável. É impressionante como não foi preciso encontrar a forma explícita dos autovalores de cada matriz. Isto vai acontecer todas as vezes que \mathbf{A} for igual ao complexo conjugado de \mathbf{B} na equação matricial $\mathbf{A}\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{B}\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$, isto é, toda vez que usamos o método Crank-Nicholson.

O segundo é o método FTCS para a Equação da Difusão. Ao aplicarmos este método teremos a equação matricial $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = [\mathbf{I} + ia'\mathbf{D}]\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$ onde \mathbf{D} é a matriz tridiagonal Toeplitz $Tridiag[1, -2, 1]$ e $a' = \frac{2k\lambda}{h^2}$. Como não podemos usar o mesmo recurso do método Crank-Nicholson, é preciso encontrarmos os autovalores μ_{Dj} da matriz \mathbf{D} . Autovalores de matrizes Tridiagonais Toeplitz há muito tempo já são conhecidos. Suponha que tenhamos uma matriz deste tipo com entradas $Tridiag[b, a, c]$, de dimensão N . Então os autovalores serão:

$$\mu_{Dj} = a + 2\sqrt{bc} \cos \left\{ \frac{j\pi}{N+1} \right\}, \quad (4.60)$$

tal que os autovalores do operador $[\mathbf{I} + ia'\mathbf{D}]$ serão

$$\mu_{Pj} = 1 + ia' \left[-2 + 2 \cos \left\{ \frac{j\pi}{N+1} \right\} \right], \quad (4.61)$$

se usarmos $\cos(x) = 1 - 2\sin^2\left(\frac{x}{2}\right)$

$$\mu_{Pj} = 1 - 4ia' \sin^2 \left\{ \frac{j\pi}{2(N+1)} \right\}. \quad (4.62)$$

Observe que a equação acima é idêntica à Eq. (4.49) obtida pelo Método de Fourier se associarmos o autovalor μ_{Pj} ao fator de amplificação⁹ $g(\beta)$ e se considerarmos que o termo $\beta_m h$ do Método de Fourier possa ser associado ao termo $\frac{j\pi}{N+1}$ do método matricial. A exigência de que $\max_j |\mu_j|^2 \leq 1$ novamente conduz à mesma condição de Courant.

⁹Mais tarde voltaremos à esta discussão e veremos que isso é possível.

4.2.3 Obtendo a Condição Para Estabilidade Através da Norma Matricial

Caso seja difícil encontrar os autovalores de uma determinada matriz há um recurso que podemos usar que às vezes pode facilitar a análise. Antes de apresentá-lo vamos enunciar dois teoremas.

Primeiro Teorema de Gershgorin: O autovalor máximo de uma matriz quadrada \mathbf{P} não pode ser maior do que a Norma 1 ou a Norma máxima da matriz.

A Norma 1 de uma matriz $M \times M$ definida como o valor máximo da soma dos módulos dos elementos de cada coluna da matriz, que escrevendo matematicamente toma a forma

$$\|\mathbf{P}\|_1 \equiv \max_{1 \leq l \leq M} \sum_k^M |a_{k,l}|, \quad (4.63)$$

enquanto a Norma máxima é o máximo da soma dos módulos dos elementos de cada linha da matriz

$$\|\mathbf{P}\|_\infty \equiv \max_{1 \leq k \leq M} \sum_l^M |a_{k,l}|. \quad (4.64)$$

Por exemplo, a matriz abaixo possui $\|\mathbf{A}\|_1 = 17$ e $\|\mathbf{A}\|_\infty = 12$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & -4 \\ 0 & -8 & 2 \\ 0 & 1 & -11 \end{bmatrix}$$

Teorema do Círculo Gershgorin [48]: Se os autovalores μ_i de uma matriz quadrada \mathbf{P} obedecem à condição $|\mu_i| \leq 1$, então $\|\mathbf{P}\|_1$ e $\|\mathbf{P}\|_\infty$ também obedecem ¹⁰.

Estes dois teoremas nos dá a alternativa de ao invés de termos sempre que encontrar os autovalores da matriz, podemos simplesmente encontrar sua Norma 1 ou sua Norma máxima. Podemos chegar a esta conclusão sem usar o Teorema do Círculo de Gershgorin se observarmos que

¹⁰Em alguns livros o Primeiro Teorema de Gershgorin é só um corolário do Teorema do Círculo.

$$\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_n) = \mathbf{P}^n \cdot \vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_0) \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \|\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_n)\| &= \|\mathbf{P}^n \cdot \vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_0)\| \leq \|\mathbf{P}^n\| \cdot \|\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_0)\| \\ \left\| \frac{\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_n)}{\vec{\epsilon}(\mathbf{X}, t_0)} \right\| &\equiv \|g\| \leq \|\mathbf{P}^n\| \leq \|\mathbf{P}\| \cdot \|\mathbf{P}\| \cdot \|\mathbf{P}\| \dots \|\mathbf{P}\| \end{aligned}$$

que novamente garante a estabilidade se $\|\mathbf{P}\| \leq 1$.

4.2.4 Observações Sobre o Método Matricial, Método de Fourier e Translações

Como parte deste trabalho vamos considerar também a seguinte análise. Como já mencionamos, a relação $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{P}\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n) = [\mathbf{C} - ia'\mathbf{D}]^{-1}[\mathbf{C} + ia'\mathbf{D}]\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$ realiza uma espécie de evolução temporal, na função $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$. Para sermos mais precisos, realiza uma espécie de translação discreta no tempo. Podemos associá-la ao operador evolução temporal $\mathbf{U} = \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}dt$, da mecânica quântica, que leva a função de onda de t para $t + dt$, onde o hamiltoniano H é hermitiano ¹¹.

Para o caso do esquema FTCS o operador translação será: $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = [I + i\frac{k\lambda}{\hbar^2}\mathbf{D}]\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n)$ inclusive com \mathbf{D} sendo hermitiano ¹². Este tipo de operador é chamado de operador unitário de transformação e têm como principal característica conservar a norma. Como nosso operador é uma aproximação, ele deve conservar a norma aproximadamente. Já vimos que o esquema FTCS não é apropriado para a Equação da Difusão, então, embora tenha sua forma bastante parecida, o operador para o esquema FTCS quando aplicado, não imita corretamente um operador translação. Para entendermos isto poderíamos pensar que o problema está na matriz tridiagonal que estamos usando. Ela é uma matriz com entradas *Tridiag*[1, -2, 1] pois usamos a aproximação $\partial_x^2 = \frac{1}{h^2}[\psi^{j-1} - 2\psi^j + \psi^{j+1}]$. Poderíamos ao invés disso discretizar a derivada segunda de acordo com a aproximação (4.29) $\partial_{xx}^2 \psi^j = \frac{1}{12h^2}(-\psi^{j-2} + 16\psi^{j-1} - 30\psi^j + 16\psi^{j+1} - \psi^{j+2}) + O(h^4)$, o que nos daria uma matriz pentadiagonal Toeplitz com entradas *Pentadiag*[-1, 16, -30, 16, -1]. Como nesta aproximação

¹¹Uma matriz hermitiana é uma matriz quadrada com entradas complexas que têm a propriedade de ser igual à sua transposta conjugada [49].

¹²As entradas de uma matriz hermitiana serão reais se e somente se ela for simétrica [49].

teríamos cinco pontos na linha temporal n para obter um ponto na linha temporal $n + 1$, as características numéricas estariam muito mais próximas da característica da Equação da Difusão (para melhor visualizar, veja a Fig. (4.5)). Teremos assim um operador melhorado. Uma outra forma de fazermos ele imitar melhor o operador translação seria fazermos h grande e k extremamente pequeno. Pela Fig. 4.5 as características numéricas alcançarão as características analíticas (observe que assim a condição de Courant será obedecida). Neste caso o operador $[I + i\frac{k\lambda}{h^2}\mathbf{D}]$ irá ser aproximadamente a matriz identidade \mathbf{I} . Porém k seria tão pequeno que a translação seria insignificante, ou h seria tão grande que o método seria inútil devido aos erros da ordem de $O(h^2)$.

Para o método Crank-Nicholson esta analogia não é muito óbvia, mas ainda é possível associá-lo a um operador translação. Para este caso, ao aplicarmos o método de estabilidade matricial e observarmos que a norma máxima será igual à 1, vemos que ele conserva a norma exatamente (ou quase exatamente). Para o método Crank-Nicholson a equação matricial será:

$$\left[\mathbf{I} - ia'\frac{k}{2}\mathbf{D}\right]\vec{\psi}^{n+1}(\mathbf{X},t) = \left[\mathbf{I} + ia'\frac{k}{2}\mathbf{D}\right]\vec{\psi}^n(\mathbf{X},t), \quad (4.66)$$

com $a' = \frac{\lambda}{h^2}$. Observe que o operador $[\mathbf{I} + ia'\frac{k}{2}\mathbf{D}]$ sozinho é o próprio operador do esquema FTCS que leva $\vec{\psi}$ de k para $\frac{k}{2}$, obviamente sem conservar a norma. Mas vamos supor que tomemos uma translação somente em um pequeno intervalo $k' \ll k$. Então o operador do lado esquerdo $[\mathbf{I} - ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}]$ seria uma translação no sentido oposto (voltando no tempo), e o que a Eq. (4.66) nos diz é que $\vec{\psi}^{n+1}(\mathbf{X},t)$ transladado $\frac{k'}{2}$ para trás é o mesmo que $\vec{\psi}^n(\mathbf{X},t)$ transladado $\frac{k'}{2}$ para frente. Supomos que isto seja uma imposição que garanta maior precisão numérica.

Agora, com k' muito pequeno o operador $[\mathbf{I} + ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}]$ pode ser pensado como um operador unitário de transformação, então o inverso dele é igual a seu transposto conjugado, de forma que podemos escrever a Eq. (4.66) como

$$\begin{aligned} \vec{\psi}^{n+1}(\mathbf{X},t) &= \left[\mathbf{I} - ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}\right]^{-1} \cdot \left[\mathbf{I} + ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}\right]\vec{\psi}^n(\mathbf{X},t) \\ &= \left[\mathbf{I} + ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}\right] \cdot \left[\mathbf{I} + ia'\frac{k'}{2}\mathbf{D}\right]\vec{\psi}^n(\mathbf{X},t). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Se considerarmos que dentro de um intervalo $k = t_1 - t_0$ fazamos uma sequência de N translações

k' , então teremos

$$\begin{aligned}\vec{\psi}^{n+1}(\mathbf{X}, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbf{I} + ia' \frac{k}{2N} \mathbf{D} \right]^N \cdot \left[\mathbf{I} + ia' \frac{k}{2N} \mathbf{D} \right]^N \vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t) \\ &= e^{ia' \frac{k}{2} \mathbf{D}} \cdot e^{ia' \frac{k}{2} \mathbf{D}} \vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t) = e^{ia' k \mathbf{D}} \vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t),\end{aligned}\quad (4.68)$$

que conserva a norma. O mesmo processo ocorre em Mecânica Quântica quando tomamos uma translação contínua em um determinado intervalo de tempo como sendo uma sequência muito grande de translações infinitesimais [50],

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbf{I} - \frac{(i\mathbf{H})(t-t_0)}{N} \right]^N = \exp \left\{ \frac{-i\mathbf{H}(t-t_0)}{\hbar} \right\}.\quad (4.69)$$

Sendo assim, podemos dizer que o operador \mathbf{L} usado no método numérico faz o papel do hamiltoniano da Mecânica Quântica. Como \mathbf{L} é uma derivada (discretizada) dizemos que faz o papel do hamiltoniano sem a parte do potencial. Mais adiante veremos que quando formos fazer simulações para a NLSE, a parte não linear pode fazer o papel do potencial do hamiltoniano.

Vesely, na Ref. [51] define o operador translação aproximada \mathbf{P} como sendo a *matriz de amplificação* cuja a equação de autovalor é $\mathbf{P}\hat{\varepsilon}_j^n = \hat{\varepsilon}_j^{n+1} = g_j \hat{\varepsilon}_j^n$, e o j -ésimo autovalor g_j é conhecido como *fator de amplificação*. É possível inclusive escrevermos o vetor erro $\vec{\varepsilon}(\mathbf{X}, t)$ expandido através de vetores da base

$$\begin{aligned}\vec{\varepsilon}(\mathbf{X}, t) &= \begin{bmatrix} \varepsilon(x_1, t) \\ \varepsilon(x_2, t) \\ \varepsilon(x_3, t) \\ \vdots \\ \varepsilon(x_{N_x}, t) \\ \varepsilon(x_{N_x+1}, t) \end{bmatrix} = \alpha_1 \begin{bmatrix} \varepsilon(x_1) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_2 \begin{bmatrix} 0 \\ \varepsilon(x_2) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \dots \alpha_{N_x+1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \varepsilon(x_{N_x+1}) \end{bmatrix} \\ &= \alpha_1 \hat{\varepsilon}_1 + \alpha_2 \hat{\varepsilon}_2 + \dots \alpha_{N_x+1} \hat{\varepsilon}_{N_x+1}\end{aligned}\quad (4.70)$$

ou, se desconsiderarmos o contorno,

$$\vec{\varepsilon}(\mathbf{X}, t_1) = \sum_{j=2}^{N_x} \alpha_j \hat{\varepsilon}_j,\quad (4.71)$$

no qual α_j é o coeficiente de expansão e atribuímos à ele a parte temporal ¹³. A relação acima é nada mais nada menos do que a Eq. (4.71). Haverá estabilidade se o fator de amplificação (autovalor) máximo $|g_j| \leq 1$. Desta forma vemos que o método matricial para estabilidade está de certa forma relacionado ao método de Fourier. No método de Fourier não foi falado em fator de amplificação máximo $\max_j g_j$, porque fizemos uma generalização [52], dizendo que a expansão $\varepsilon^{j \pm p, n \pm q} = \sum_m e^{i\beta_m(x_j \pm ph)} e^{\omega(t_n \pm qk)}$ pode ser feita em qualquer ponto x_j . Obviamente em um deles g_j será igual à $\max_j g_j$. A expansão em séries de Fourier finitas é feita para cada ponto de uma linha temporal discretizada, inclusive para os pontos do contorno, isto é, a expansão é feita também nas entradas não nulas dos autovetores $\hat{\varepsilon}_1$ e $\hat{\varepsilon}_{N_x+1}$. Também, devido a imposição de condições de contorno periódicas, $\hat{\varepsilon}_1 = \hat{\varepsilon}_{N_x+1}$.

Se \mathbf{P} é um operador translação aproximado, então existe um operador translação exato, que aqui vamos chamar de \mathbf{T} que leva a solução exata $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$ para $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t + dt)$. Veja que embora as soluções estejam discretizadas no espaço elas continuam sendo exatas. Se supormos, por exemplo, que a solução exata obedeça à separação de variáveis $\psi(x, t) = \phi_1(x)\phi_2(t)$ com $\phi_2(t) = e^{i\omega_j t}$ então discretizamos $\phi_1(x)$, mantendo a parte temporal sem discretizar ¹⁴. A função permanece exata porque a discretização "não foi feita em um computador", o que produziria erros de arredondamento.

Podemos escrever

$$\vec{\psi}(\mathbf{X}, t) = \begin{bmatrix} \phi(x_1)e^{i\omega_1 t} \\ \phi(x_2)e^{i\omega_2 t} \\ \phi(x_3)e^{i\omega_3 t} \\ \vdots \\ \phi(x_{N_x})e^{i\omega_{N_x} t} \\ \phi(x_{N_x+1})e^{i\omega_{N_x+1} t} \end{bmatrix}. \quad (4.72)$$

É possível dizermos que o operador translação exata \mathbf{T} possui autovalores $e^{i\omega_j dt}$ de tal forma que quando atua no vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$ realiza a translação da seguinte forma:

¹³Pelo menos na mecânica quântica o operador evolução temporal atua nos coeficientes de expansão. Apesar dos coeficientes de expansão mudarem com o tempo, a soma $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \dots + |\alpha_n|^2$ permanece constante. Aqui n é a quantidade de termos que temos na expansão.

¹⁴Este processo se chama *método das linhas* [16, 53].

$$\begin{bmatrix} e^{i\omega_1 dt} & & & & & & 0 \\ & e^{i\omega_2 dt} & & & & & \\ & & e^{i\omega_3 dt} & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & e^{i\omega_{N_x} dt} & & \\ 0 & & & & & & e^{i\omega_{N_x+1} dt} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi(x_1)e^{i\omega_1 t} \\ \phi(x_2)e^{i\omega_2 t} \\ \phi(x_3)e^{i\omega_3 t} \\ \vdots \\ \phi(x_{N_x})e^{i\omega_{N_x} t} \\ \phi(x_{N_x+1})e^{i\omega_{N_x+1} t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi(x_1)e^{i\omega_1(t+dt)} \\ \phi(x_2)e^{i\omega_2(t+dt)} \\ \phi(x_3)e^{i\omega_3(t+dt)} \\ \vdots \\ \phi(x_{N_x})e^{i\omega_{N_x}(t+dt)} \\ \phi(x_{N_x+1})e^{i\omega_{N_x+1}(t+dt)} \end{bmatrix}. \quad (4.73)$$

Supondo agora que o vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$, assim como o vetor erro também possa ser expandido em autofunções da base, e supondo que nosso operador translação exata possa realmente ser escrito na forma (4.73), quando o aplicarmos à $\hat{\psi}_j = [0, \dots, \psi(x_j, t), 0]$ teremos a equação de autovalor $\mathbf{T}\hat{\psi}_j^n = \hat{\psi}_j^{n+1} = e^{i\omega_j dt} \hat{\psi}_j^n$, que é uma equação semelhante à $\mathbf{P}\hat{\epsilon}_j^n = \hat{\epsilon}_j^{n+1} = g_j \hat{\epsilon}_j^n$, que consideramos para o erro.

Nos indagamos se os autovetores $\hat{\psi}_j$ também obedecem à equação de autovalor para a matriz de amplificação

$$\mathbf{P}\hat{\psi}_j^n = g_j \hat{\psi}_j^n = \hat{\psi}_j^{n+1}. \quad (4.74)$$

Neste caso consideramos que o erro é definido como $\epsilon = \psi_E - \psi_A$. Além do mais podemos dizer que os autovalores μ_P de \mathbf{P} são aproximações para os autovalores da translação exata $e^{i\omega dt}$. Se esta suposição estiver certa μ_P deve convergir para $e^{i\omega dt}$ a medida que o método numérico se torna mais preciso. Se a translação \mathbf{P} do método Crank-Nicholson for aplicada à um vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$ teremos a seguinte equação de autovalor para cada um dos autovetores $\hat{\psi}_j = [0, \dots, \psi(x_j, t), \dots, 0]$:

$$\mathbf{P}\hat{\psi}_j = \frac{1 + ia' \frac{k}{2} \mathbf{D}}{1 - ia' \frac{k}{2} \mathbf{D}} \hat{\psi}_j = \frac{1 + ia' \frac{k}{2} \mu_{\mathbf{D}j}}{1 - ia' \frac{k}{2} \mu_{\mathbf{D}j}} \hat{\psi}_j. \quad (4.75)$$

Se, como fizemos anteriormente, tomarmos uma sequência N de translações infinitesimais, teremos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{[1 + ia' \frac{k}{2N} \mu_{\mathbf{D}j}]^N}{[1 - ia' \frac{k}{2N} \mu_{\mathbf{D}j}]^N} \hat{\psi}_j = \frac{e^{ia' \frac{k}{2} \mu_{\mathbf{D}j}}}{e^{-ia' \frac{k}{2} \mu_{\mathbf{D}j}}} \hat{\psi}_j = e^{ia' k \mu_{\mathbf{D}j}} \hat{\psi}_j = e^{ia' k \mu_{\mathbf{D}j}} \hat{\psi}_j. \quad (4.76)$$

Note que a relação acima é uma implicação do resultado obtido em (4.69), pois $e^{ia' k \mathbf{D}} \vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t)$ aplicado à $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$ implica que também está aplicado à $\hat{\psi}_j$, de forma que teremos a equação

$$e^{ia' k \mathbf{D}} \hat{\psi}_j = e^{ia' k \mu_{\mathbf{D}j}} \hat{\psi}_j, \quad (4.77)$$

no qual os autovalores $e^{ia'k\mu_{\mathbf{D}j}}$ são obtidos se fizermos a expansão de $e^{ia'k\mathbf{D}}$ e aplicarmos à $\hat{\psi}_j$.

Assim como em (4.69), quando tomamos o limite de k indo para zero o erro temporal se anula, mas o erro de discretização espacial permanece devido à \mathbf{D} ser $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$ discretizado. Neste limite observamos que os autovalores $e^{ia'k\mu_{\mathbf{D}j}}$ se tornaram mais parecidos com os autovalores exatos de translação $e^{i\omega_j dt}$.

Observe que este limite que nos dá uma aproximação melhor, é feito somente para fins de análise para que seja possível observarmos como a translação discretizada converge para a translação analítica. Na prática o que será implementado é o operador \mathbf{P} que pode ser pensado como uma expansão da exponencial $e^{ia'k\mu_{\mathbf{D}j}}$.

Respondendo à nossa indagação anterior, se ψ for igual à função exata ψ_E , então é melhor escrevermos a Eq. (4.74) como

$$\mathbf{P}\hat{\psi}_{Ej}^n = g_j \hat{\psi}_{Ej}^n \approx \hat{\psi}_{Ej}^{n+1} \quad (4.78)$$

Esperamos que futuramente todas estas observações nos permitam uma melhor compreensão do funcionamento dos operadores de translação exata e os operadores de translação aproximada (matrizes de amplificação).

Análise do fator de Amplificação

Vimos que para o caso do esquema FTCS aplicado à Equação da Difusão o fator de amplificação é

$$g(\beta_m) = \frac{e^{\omega(t_n+k)}}{e^{\omega t_n}} = e^{\tilde{\omega}k} = 1 - 4i \frac{\lambda k}{h^2} \sin^2 \left(\frac{\beta_m h}{2} \right), \quad (4.79)$$

tal que $e^{\tilde{\omega}k}$ seria o análogo numérico do autovalor exato de translação $e^{i\omega dt}$ e $\tilde{\omega} = a'k\mu_{\mathbf{D}} \approx \omega$. Se este análogo numérico for expandido teremos o lado direito da equação acima tal que podemos afirmar que $\tilde{\omega}k = -4i \frac{\lambda k}{h^2} \sin^2 \left(\frac{\beta_m h}{2} \right) + O(k^2)$. Conforme já mencionamos anteriormente, alguns autores preferem ressaltar que o expoente do fator de amplificação $e^{\tilde{\omega}k}$ é complexo, significando que ele pode ter uma parte real e uma imaginária. A parte real seria a responsável por fazer $e^{\tilde{\omega}k}$ crescer para simulações com tempos muito longos. Mas de onde vem esta parte real? Nos arriscamos a dar uma explicação. Se formos escrever os erros de discretização de uma forma explícita teríamos que

acrescentar os termos $k^2 \frac{\partial^2}{2\partial t^2}$ e $-ih^2 \frac{\partial^4}{12\partial x^4}$ do lado direito da Eq. (4.79), de forma que o erro temporal seria a parte real. Para ficar mais claro vamos escrever novamente o fator de amplificação levando em conta estas análises:

$$e^{\tilde{\omega}k} = \exp\left\{-4i\frac{\lambda k}{h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) - i\lambda \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + k^2 \frac{\partial^2}{2\partial t^2}\right\}. \quad (4.80)$$

Usando a própria Equação da Difusão podemos trocar o operador diferencial $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ por $-\lambda^2 \frac{\partial^4}{\partial x^4}$ e depois de discretizarmos as derivadas temporais e aplicarmos os operadores matriciais correspondentes, podemos escrever a exponencial somente em função dos autovalores:

$$e^{\tilde{\omega}k} = \exp\left\{\left(-4i\frac{\lambda}{h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) - i\lambda \frac{1}{12kh^2} \mathbf{D}^2 - \lambda^2 \frac{k}{2h^4} \mathbf{D}^2\right)k\right\}. \quad (4.81)$$

onde \mathbf{D}^2 corresponde ao operador derivada quarta discretizado (escrevemos os operadores por simplicidade, mas assim como nos outros termos poderíamos escrever os autovalores ao invés dos operadores). Escrevemos o expoente desta forma pois assim podemos verificar que, conforme nos diz a Condição de Courant, ao diminuirmos k ou aumentarmos h a parte real vai para zero muito mais rápido que a parte imaginária evitando que para simulações muito longas o erro se acumule. Novamente ressaltamos que embora isto garanta a estabilidade, não traz resultados práticos.

Podemos fazer a mesma análise para o método Crank-Nicholson. Lembrando que neste caso o erro em k escrito na forma explícita é $\frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}$. Teremos então,

$$\frac{1 + i\frac{\lambda k}{2h^2} \mu_{\mathbf{D}j}}{1 - i\frac{\lambda k}{2h^2} \mu_{\mathbf{D}j}} = \frac{1 + i\frac{\lambda k}{2h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) - i\lambda \frac{h^2}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}}{1 - i\frac{\lambda k}{2h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) + i\lambda \frac{h^2}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}} \approx \frac{\exp\left\{i\frac{\lambda k}{2h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) - i\lambda \frac{h^2}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}\right\}}{\exp\left\{-i\frac{\lambda k}{2h^2} \sin^2\left(\frac{\beta_m h}{2}\right) + i\lambda \frac{h^2}{24} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}\right\}}. \quad (4.82)$$

O erro temporal ¹⁵ $\frac{k^3}{12} \frac{\partial^3}{\partial t^3}$ não é real pois quando substituimos as derivadas temporais pelas derivadas espaciais ele se tornará $-i\lambda^3 \frac{k^3}{12} \frac{\partial^6}{\partial x^6}$.

¹⁵Na equação (4.82) usamos uma forma bastante simplificada para o erro do método Crank-Nicholson. A forma correta é a que foi dada na Eq. (4.34). Fizemos assim porque nesta seção estamos fazendo somente algumas observações sobre uma possível relação entre o erro e estabilidade. Em trabalhos futuros pretendemos fazer uma análise mais rigorosa com o objetivo de que os resultados que obtivermos possam ser utilizados na otimização de simulações numéricas.

Discretizando todas as derivadas espaciais finalmente podemos escrever

$$e^{\tilde{\omega}k} \approx \frac{\exp \left\{ \left(i \frac{\lambda}{2h^2} \sin^2 \left(\frac{\beta_m h}{2} \right) - i \frac{\lambda}{24kh^2} \mathbf{D}^2 + i \lambda^3 \frac{k^2}{12h^6} \mathbf{D}^3 \right) k \right\}}{\exp \left\{ \left(-i \frac{\lambda}{2h^2} \sin^2 \left(\frac{\beta_m h}{2} \right) + i \frac{\lambda}{24kh^2} \mathbf{D}^2 - i \lambda^3 \frac{k^2}{12h^6} \mathbf{D}^3 \right) k \right\}} \quad (4.83)$$

onde \mathbf{D}^2 e \mathbf{D}^3 correspondem aos operadores discretizados para as derivadas quarta e sexta respectivamente.

Note que o método Crank-Nicholson é conhecido por ser incondicionalmente estável. Olhando a relação acima podemos ver que o termo em que fazemos o truncamento não fará a solução crescer independente dos valores de k e h , não havendo assim um Numero de Courant ¹⁶. Vesely destaca que quando fazemos $k \rightarrow \infty$ o método se torna marginalmente estável, isto é, o erro não cresce, mas também não decai. Talvez a relação que acabamos de escrever nos diz alguma coisa sobre isso. Seria extremamente valioso se, em trabalhos futuros conseguíssemos relacionar erro e estabilidade.

4.3 Convergência e Consistência

4.3.1 Convergência

O conceito de convergência é de grande importância em métodos numéricos e geralmente está associado à estabilidade [31]. Na Ref. [51] encontramos a seguinte definição: *Um esquema de diferenças finitas é convergente se sua solução ψ_A se aproxima da solução da equação diferencial ψ_E à medida que fazemos $k \rightarrow 0$.*

Em outros livros há definições de convergência que são enunciadas de forma mais geral. A explicação abaixo se encontra em na Ref. [31]. Considere uma equação diferencial

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_E(\psi) &= 0, & \text{em uma região } \mathbf{D} \\ \psi_E &= f_E, & \text{em } \Gamma, \end{aligned} \quad (4.84)$$

¹⁶O fato de não haver um Número de Courant para o Crank-Nicholson não é desejável pois através dele podemos descobrir para qual k e h o erro será mínimo. Por exemplo, para o caso da equação de onda em uma dimensão a Ref. [54] mostra que o erro será menor à medida que o Número de Courant vai de 0.5 para 0.9, isto é se aproxima do valor necessário para estabilidade. Diversos autores estudaram formas alternativas de se obter um análogo do Número de Courant para o esquema Crank-Nicholson. Veja por exemplo a Ref. [55] e as referências citadas.

tal que Γ é o contorno de \mathbf{D} , \mathbf{L}_E é um operador que se aplicado à ψ nos dá a equação diferencial, ψ_E é a solução analítica, e f_E é a condição de contorno analítica. Vamos usar também a notação ψ_A para a solução aproximada e \mathbf{L}_A é o operador discretização que se aplicado à ψ nos dá a equação diferencial discretizada. Se discretizarmos esta equação diferencial de forma que o intervalo espacial seja h , e se tomarmos um ponto irregular \mathbf{P} dentro da região \mathbf{D} à uma distância h do contorno, teremos

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_A(\psi) &= 0, & \text{em uma região } \mathbf{D} \\ \psi_A &= f_A & \text{em } \Gamma. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Dizemos que o método é convergente se ao fazermos $h \rightarrow 0$ a solução discretizada ψ_A converge para a solução exata $\psi_E(\mathbf{P})$ com as mesmas condições de contorno [31].

A Ref. [56] faz a mesma definição porém envolve também k : *Um esquema de diferenças finitas é dito convergente de ordem (p,q) se a qualquer tempo fixo nt , $\|\psi_E - \psi_A\| = O(k^p) + O(h^q)$ no limite $k, h \rightarrow 0$.*

Parece que das três definições citadas acima, a definida na Ref. [31] enfatiza a importância de que as mesmas regras definidas na Ref. [51] sejam também obedecidas próximas ao contorno das soluções. Estas definições sugerem que duas coisas podem ocorrer ao se aplicar um método numérico à uma equação diferencial:

- (i) às vezes, o método pode estar bem condicionado para determinado h e k , mas ao se diminuir mais ainda a discretização a solução não convergirá para a solução exata.
- (ii) Pode ocorrer de o método conduzir à condições de contorno diferente das previamente definidas.

Ainda em relação às condições de contorno, a Ref. [38] nos diz o seguinte: “ *As condições de contorno de Dirichlet ($\psi = f$) podem ser aplicadas exatamente caso f seja uma função analítica. Todavia erros são introduzidos caso tenhamos condições de contorno de Neumann ou mistas*”.

Esta explicação é razoável se levarmos em conta o fato de que uma função será analítica em um ponto se sua série de Taylor converge para o valor exato da função nas vizinhanças deste ponto, e

que grande parte dos métodos numéricos de diferenças finitas são construídos através de expansões da função em série de Taylor. Além do mais um dos requisitos para que o problema físico seja matematicamente bem comportado é que a solução dependa continuamente das condições auxiliares (de contorno e inicial), conforme ilustramos no Cap. 2.

4.3.2 Consistência

Em métodos numéricos pode acontecer de ao se discretizar uma equação diferencial parcial para problemas com valor inicial, embora o método seja estável, a diminuição do intervalo temporal k resulte em uma solução de uma outra equação diferencial, um fenômeno que não ocorre em métodos usados para Equações Diferenciais Ordinárias. Quando isto acontece dizemos que o método não é consistente. Para fins de ilustração considere a Equação da Difusão (4.1). Se discretizarmos esta equação usando o método Crank-Nicholson a forma explícita do erro, de acordo com o resultado (4.25) pode ser escrita como

$$O \left[\frac{k}{2} \left(\partial_x^2 \partial_t \psi^{j,n} - \partial_t^2 \psi^{j,n} \right) + \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^2 + \frac{k^2}{4} \left(\partial_x^2 \partial_t^2 \psi^{j,n} - \frac{2}{3} \partial_t^3 \psi^{j,n} \right) \right] = \mathbf{F} \psi^{j,n} + \partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n}, \quad (4.86)$$

no qual \mathbf{F} é o operador discretização, de modo que o erro seja a diferença entre a equação diferencial discretizada e a equação diferencial escrita em sua forma exata. Se a Equação da Difusão (4.1) for discretizada usando um outro método chamado de Método Du Fort-Frankel [31], o erro será

$$O \left[\frac{k^2}{6} \partial_t^3 - \frac{1}{12} \partial_x^4 \psi^{j,n} h^2 + \frac{k^2}{h^2} \partial_t^2 \psi^{j,n} \right] = \mathbf{F} \psi^{j,n} + \partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n}. \quad (4.87)$$

Quando tomamos $k, h \rightarrow 0$ o erro do Método Crank-Nicholson se anulará, enquanto o erro para o Método Du Fort-Frankel vai para zero se k for para zero mais rápido que h . Caso eles forem para zero à uma mesma taxa, isto é, $k/h = \beta$, então esta aproximação será consistente não com a Equação da Difusão, mas com a equação

$$\partial_x^2 \psi^{j,n} - \partial_t \psi^{j,n} + \beta^2 = 0, \quad (4.88)$$

mesmo o Método Du Fort-Frankel sendo sempre estável. Podemos observar, pela Eq. (4.34) que o Método de Diferenças Finitas Compacto de Quarta Ordem também é consistente.

Existe uma relação entre consistência, convergência e estabilidade de um método, que é chamada de Teorema da Equivalência de Lax que não vamos demonstrar, e que é enunciada da seguinte forma:

Teorema da Equivalência de Lax: Dado um problema de valor sobre o contorno que seja aproximado usando diferenças finitas, tal que o método numérico usado seja consistente, então a estabilidade é a condição necessária e suficiente para a convergência do método. Isto é, se o método é consistente e estável, então ele é convergente.

Podemos usar este teorema para entendermos melhor a condição de Courant. Vemos que se o domínio de dependência numérico estiver dentro do domínio de dependência da equação diferencial, ao fazermos $h \rightarrow 0$ as características numéricas não vão coincidir com as características da equação diferencial (veja novamente a Fig. 4.4), então a condição para que haja convergência do método não será obedecida. Se o método não é convergente, pelo Teorema da Equivalência de Lax, é porque ou ele não é consistente, ou não é estável, ou ambos. Assim compreendemos melhor como a Condição de Courant influencia a estabilidade. De fato, conforme citamos anteriormente, quando a condição CFL foi formulada em 1928, os autores pretendiam estudar como soluções numéricas convergiam para soluções de equações diferenciais. Na Ref. [57] LeVeque ressalta: *“Um dos primeiros artigos em métodos de diferenças finitas para PDE’s foi escrito em 1928 por Courant, Friedrichs e Lewy. Eles usaram métodos de diferenças finitas como uma ferramenta analítica para provar a existência de soluções de certas PDE’s. A idéia era definir uma sequência de soluções aproximadas (via equações de diferenças finitas), provar que elas convergem à medida em que a grade é refinada, e mostrar que a função limite deve satisfazer a PDE, dando a existência da solução”*.

4.4 O método Split-Step para sistemas de EDO

Vamos considerar o Problema de Cauchy para um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\frac{d}{dt} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t) = (\mathbf{L} + \mathbf{M}) \vec{\psi}(\mathbf{X}, t) \quad 0 < t \leq TT, \quad (4.89)$$

onde $\vec{\psi}(\mathbf{X}, 0) \equiv \vec{\psi}_0$ e TT é o intervalo de tempo que estamos levando em consideração. Vamos definir $k \ll TT$ tal que $TT = Nk$ onde $N \in \mathbb{N}^*$. Como o intervalo TT agora está dividido em N partes iguais e contém $N + 1$ pontos, podemos aplicar o problema de Cauchy em cada um dos intervalos,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{L} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_2^{n-1}[\mathbf{X}, nk] \end{aligned} \quad (4.90)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{M} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, nk], \end{aligned} \quad (4.91)$$

com $n = 1 \dots N$ onde $\vec{\psi}_0 \equiv \vec{\psi}(\mathbf{X}, 0)$ e a função $\vec{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, nk) \equiv \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, nk)$ é conhecida como a solução separada do problema¹⁷ e é definida nos pontos $t_n = nk$ com $n = 0, 1, 2 \dots N$.

Vemos agora que para cada intervalo k temos dois problemas mais simples do que o original tal que a solução de um está relacionada à solução do outro via condição inicial. Se tomarmos por exemplo $n = 1$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_1^1(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{L} \vec{\psi}_1^1(\mathbf{X}, t), \quad (0 < t \leq k) \\ \vec{\psi}_1^1(\mathbf{X}, k) &= e^{\mathbf{L}k} \vec{\psi}_1^1(\mathbf{X}, 0) = e^{\mathbf{L}k} \vec{\psi}_0, \end{aligned} \quad (4.92)$$

da mesma forma,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_2^1(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{M} \vec{\psi}_2^1(\mathbf{X}, t) \quad (0 < t \leq k) \\ \vec{\psi}_2^1(\mathbf{X}, k) &= e^{\mathbf{L}k} \vec{\psi}_2^1(\mathbf{X}, 0) = e^{\mathbf{L}k} e^{\mathbf{M}k} \vec{\psi}_0, \end{aligned} \quad (4.93)$$

¹⁷Parece haver uma redundância em se usar a notação $\vec{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, t)$, pois o índice n já indica que escolhemos um ponto n da linha temporal discretizada não havendo mais necessidade da variável t no argumento. Porém no caso do método *split-step* quando tomamos um ponto n , não significa que já atribuímos um valor específico para esta função, veja que há um intervalo em que ela é definida, por exemplo $(n-1)k < t \leq nk$. Neste intervalo ela é diferenciável.

que é a função $\overrightarrow{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, k)$ que definimos no espaço discreto. Finalmente comparamos a solução desta equação com a solução exata da Eq. (4.89) em $t = k$

$$\overrightarrow{\psi}(\mathbf{X}, k) = \exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] \overrightarrow{\psi}_0. \quad (4.94)$$

As duas soluções serão equivalentes se $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$. Caso \mathbf{L} e \mathbf{M} não comutem haverá um erro de aproximação chamado *local splitting error* definido como

$$E_{rr,sp}(k) \equiv \overrightarrow{\psi}(\mathbf{X}, k) - \overrightarrow{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, k) = \exp[(\mathbf{M} + \mathbf{L})k] \overrightarrow{\psi}_0 - \exp(\mathbf{L}k) \exp(\mathbf{M}k) \overrightarrow{\psi}_0. \quad (4.95)$$

Esta operação pode ser feita expandindo-se as duas exponenciais. A primeira expansão ficará na forma

$$\begin{aligned} \exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] &= \mathbf{I} + (\mathbf{L} + \mathbf{M})k + \frac{1}{2!}(\mathbf{L} + \mathbf{M})^2 k^2 + O(k^3) \\ &= \mathbf{I} + (\mathbf{L} + \mathbf{M})k + \frac{1}{2!}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{M}^2)k^2 + \frac{1}{2!}(\mathbf{M} \cdot \mathbf{L})k^2 + \frac{1}{2!}(\mathbf{L} \cdot \mathbf{M})k^2 + O(k^3), \end{aligned} \quad (4.96)$$

e a segunda

$$\begin{aligned} \exp[\mathbf{L}k] \exp[\mathbf{M}k] &= [\mathbf{I} + \mathbf{L}k + \frac{1}{2!}\mathbf{L}^2 k^2 + O(k^3)] \cdot [\mathbf{I} + \mathbf{M}k + \frac{1}{2!}\mathbf{M}^2 k^2 + O(k^3)] \\ &= \mathbf{I} + (\mathbf{L} + \mathbf{M})k + \frac{1}{2!}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{M}^2)k^2 + (\mathbf{L} \cdot \mathbf{M})k^2 + O(k^3). \end{aligned} \quad (4.97)$$

Comparando os dois lados vemos que a solução exata $\overrightarrow{\psi}(\mathbf{X}, k)$ será igual à solução separada $\overrightarrow{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, k)$ se $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$, caso esta condição não seja obedecida a expansão será truncada no termo que contém $[\mathbf{L}, \mathbf{M}]$, que neste caso específico, obteremos $\overrightarrow{\psi}(\mathbf{X}, k) - \overrightarrow{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, k) = O(k^2)$. Neste caso dizemos que o *Splitting Sequential* tem precisão de *primeira ordem* no tempo. Um *splitting* terá aproximação de p -ésima ordem se para o erro de *splitting* local a relação,

$$\|E_{rr,sp}(k)\| = O(k^{p+1}) \quad (4.98)$$

é assegurada.

O método de *splitting* que acabamos de ilustrar é conhecido como *splitting sequencial* e é o método mais simples e de menor precisão. Há uma diversidade de outros métodos com melhor aproximação, porém neste trabalho vamos utilizar somente o conhecido método de *splitting de*

Strang-Marchuk, conhecido também como *splitting* simétrico proposto em 1968 [16]. O método de *Splitting de Strang-Marchuk* consiste em separarmos nosso problema de Cauchy inicial (4.89) em três problemas mais simples

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{L} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq (n-0.5)k \\ \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_3^{n-1}[\mathbf{X}, (n-1)k], \end{aligned} \quad (4.99)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{M} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-0.5)k] \end{aligned} \quad (4.100)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_3^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{L} \vec{\psi}_3^n(\mathbf{X}, t), & (n-0.5)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_3^n[\mathbf{X}, (n-0.5)k] &= \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, nk], \end{aligned} \quad (4.101)$$

no qual $\vec{\psi}_3^0(\mathbf{X}, 0) \equiv \vec{\psi}_0$ é a função $\vec{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, nk) \equiv \vec{\psi}_3^n(\mathbf{X}, nk)$ definida nos pontos $t_n = nk$, ($n = 0, 1 \dots N$).

Ao verificarmos a ordem de aproximação,

$$E_{rr,sp}(k) \equiv \vec{\psi}(\mathbf{X}, k) - \vec{\psi}_{SP}^n(\mathbf{X}, k) = \left\{ \exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] - \exp\left(\frac{k\mathbf{L}}{2}\right) \exp(\mathbf{M}k) \exp\left(\frac{k\mathbf{L}}{2}\right) \right\} \vec{\psi}_0, \quad (4.102)$$

observamos que a condição para que o erro se anule é novamente $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$. Ao expandirmos as duas exponenciais vemos que o método *Splitting de Strang-Marchuk* tem precisão de segunda ordem em k .

Podemos substituir a solução do problema de Cauchy (4.89) por uma fórmula mais geral [16]

$$\exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] \approx \exp[k\delta_n \mathbf{L}] \exp[k\alpha_n \mathbf{M}] \dots \exp[k\delta_1 \mathbf{L}] \exp[k\alpha_1 \mathbf{M}], \quad (4.103)$$

onde δ_n e α_n são constantes e $n \in \mathbb{Z}^*$. Assim é possível se obter vários métodos de *splitting* usando a relação acima. Por exemplo para obter o *Splitting Sequential* usamos $n = 1$ onde os coeficientes

$\delta_1 = \alpha_1 = 1$:

$$\exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] \approx \exp[k\mathbf{L}] \exp[k\mathbf{M}]. \quad (4.104)$$

O valor dos coeficientes são escolhidos por conveniência. Por exemplo, se escolhermos $n = 2$ teremos

$$\exp[(\mathbf{L} + \mathbf{M})k] \approx \exp[k\delta_2\mathbf{L}] \exp[k\alpha_2\mathbf{M}] \exp[k\delta_1\mathbf{L}] \exp[k\alpha_1\mathbf{M}], \quad (4.105)$$

e ao expandirmos as exponenciais devemos escolher os coeficientes apropriados para $\delta_1, \alpha_1, \delta_2, \alpha_2$, que no caso do *Splitting de Strang-Marchuk* $\delta_2 = 0, \delta_1 = 1, \alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$ resulta na equação

$$E_{rr,sp}(k) = \frac{1}{24}(\mathbf{M}\mathbf{L}^2 + \mathbf{L}^2\mathbf{M} + 4\mathbf{M}\mathbf{L}\mathbf{M} - 2\mathbf{L}\mathbf{M}\mathbf{L} - 2\mathbf{L}\mathbf{M}^2 - 2\mathbf{M}^2\mathbf{L})k^3 + O(k^4). \quad (4.106)$$

Assim, os coeficientes devem ser escolhidos de tal forma que o erro se anule caso a relação $[\mathbf{L}, \mathbf{M}] = 0$ seja obedecida. Esta é justamente a condição necessária para que a famosa identidade

$$\exp(\mathbf{L}) \exp(\mathbf{M}) = \exp(\mathbf{L} + \mathbf{M}) = \exp(\mathbf{M} + \mathbf{L}) = \exp(\mathbf{M}) \exp(\mathbf{L}), \quad (4.107)$$

seja válida.

4.4.1 O Split-Step como método de discretização de Equações Diferenciais Lineares

Vamos tomar como exemplo a equação diferencial linear com dois operadores que não dependam do tempo:

$$\partial_t \psi(x, t) = \partial_x^i \psi(x, t) + \partial_x^j \psi(x, t), \quad (4.108)$$

tal que $i \neq j \in \mathbb{Z}^*$ representam a ordem da derivação. Podemos usar um método numérico para discretizarmos estes operadores diferenciais conforme foi feito em seções anteriores, e isto nos dará uma equação matricial do tipo

$$\frac{d}{dt} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t) = (\mathbf{L} + \mathbf{M}) \vec{\psi}(\mathbf{X}, t). \quad (4.109)$$

A solução exata em $t = k$ será:

$$\vec{\psi}(\mathbf{X}, k) = \exp[(\mathbf{M} + \mathbf{L})k] \vec{\psi}_0. \quad (4.110)$$

A equação linear (4.108) escrita da forma (4.109) nos permite o uso de métodos de *splitting* como método de discretização local do eixo temporal. Observe que o operador exponencial, assim como o operador \mathbf{P} para diferenças finitas na Eq. (4.52), é responsável por fazer o vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t)$ transladar um passo n no eixo temporal discretizado. Podemos defini-lo como sendo um operador *splitting* de translação \mathbf{P}_{SP} :

$$\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1}) = \mathbf{P}_{\text{SP}} \vec{\psi}(\mathbf{X}, t_n). \quad (4.111)$$

O operador \mathbf{P}_{SP} pode ser escrito de acordo com o método de *splitting* utilizado, por exemplo,

$$\mathbf{P}_{\text{SP}}(k) \equiv \exp\left(\frac{k\mathbf{L}}{2}\right) \exp(\mathbf{M}k) \exp\left(\frac{k\mathbf{L}}{2}\right), \quad (4.112)$$

para o *Splitting de Strang-Marchuk* e

$$\mathbf{P}_{\text{SP}}(k) \equiv \exp(\mathbf{L}k) \exp(\mathbf{M}k), \quad (4.113)$$

para o *Splitting Sequencial*.

Como o split-step é um tipo de discretização, há também a necessidade de se fazer análise de consistência, estabilidade e convergência. No caso da estabilidade e da consistência, as análises são bem mais complicadas do que para os métodos de diferenças finitas. Descrições mais gerais podem ser encontradas nas Ref. [16, 58]. Para a convergência, basta usar o Teorema da Equivalência de Lax. Segundo é mostrado na Ref. [58], o *splitting* de Strang-Marchuk é consistente e estável, e conseqüentemente convergente. Em nosso trabalho não iremos fazer uma análise rigorosa para a estabilidade do split-step. Porém considerando que $\mathbf{P}_{\text{SP}}(k)$ é o operador translação, neste trabalho vamos, a grosso modo, supor que o método será estável caso

$$\rho(\mathbf{P}_{\text{SP}}(k)) \leq 1, \quad (4.114)$$

que é equivalente à dizer que $\|\mathbf{P}_{\text{SP}}(k)\| \leq 1$ deve ser obedecida. Isto será verificado, apenas como motivação, na próxima seção.

O erro para equações lineares do tipo (4.108) será sempre zero porque operadores diferenciais irão sempre comutar.

É possível mostrar que esta aproximação pode tranquilamente ser substituída pelo método Crank-Nicholson. Se nossa relação (4.78) for realmente válida, podemos usar a matriz de amplificação do método Crank-Nicholson atuando em $\vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t)$ para obtermos uma solução $\vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t)$:

$$\left[\mathbf{I} - i\frac{k}{2}\mathbf{L} \right]^{-1} \cdot \left[\mathbf{I} + i\frac{k}{2}\mathbf{L} \right] \hat{\psi}_j^n = \frac{1 + i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j}}{1 - i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j}} \hat{\psi}_j^n, \quad (4.125)$$

onde $\mu_{\mathbf{L}j}$ é o j -ésimo autovalor da matriz \mathbf{L} . Expandindo o denominador através da relação

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots \quad (4.126)$$

teremos

$$\begin{aligned} \frac{1 + i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j}}{1 - i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j}} &= \left[1 + i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j} \right] \left[1 + i\frac{k}{2}\mu_{\mathbf{L}j} - \frac{k^2}{4}\mu_{\mathbf{L}j}^2 - i\frac{k^3}{8}\mu_{\mathbf{L}j}^3 + O(k^4) \right] \\ &= 1 + ik\mu_{\mathbf{L}j} - \frac{k^2}{2}\mu_{\mathbf{L}j}^2 + O(k^3) \end{aligned} \quad (4.127)$$

que pode ser associado à expansão (4.124) aplicada à $\vec{\psi}^n(\mathbf{X}, t)$. Vamos dizer então que o operador $e^{k\mathbf{L}}$ é aproximadamente o operador Crank-Nicholson $[\mathbf{I} - i\frac{k}{2}\mathbf{L}]^{-1} \cdot [\mathbf{I} + i\frac{k}{2}\mathbf{L}]$ cujo a norma máxima já provamos ser ≤ 1 no início deste capítulo. Isto garante a estabilidade. Parece que, quase trivialmente, se extrai o método Crank-Nicholson do operador $e^{k\mathbf{L}}$ expandido e truncado em $O(h^2)$. Porém no método em que nosso trabalho se baseia (Compact SSFD) o operador expandido $e^{k\mathbf{L}}$ é substituído não pelo operador Crank-Nicholson mas pelo operador $[\mathbf{C} - i\frac{k}{2}\mathbf{L}]^{-1} \cdot [\mathbf{C} + i\frac{k}{2}\mathbf{L}]$ onde $\mathbf{C} = [1, 10, 1]$ é uma matriz tridiagonal. Podemos supor que na prática o operador $e^{k\mathbf{L}}$ é expandido primeiro (com \mathbf{L} já discretizado) e depois é substituído por um esquema de diferenças finitas que melhor se assemelhe a esta expansão, não precisando ser idêntico.

Conforme já mencionamos, o operador $e^{k\mathbf{L}}$ funciona como uma espécie de evolução temporal aproximada onde \mathbf{L} seria uma espécie de hamiltoniano aproximado sem o potencial (naquela ocasião estávamos levando em consideração a Equação da Difusão). Para o caso que estamos tratando agora, se a parte não linear da NLSE $|\psi(x, t)|^2$ for pensada como um potencial, e se usarmos o *Splitting Sequential*, de fato teremos a parte potencial do hamiltoniano. Obviamente $|\psi(x, t)|^2$ seria um potencial que depende do tempo, como ocorre na maioria das vezes em mecânica

quântica [50]. Talvez seja por este motivo que escolhe-se usar o splitting de Strang-Marchuck na forma $e^{\int_{t_n}^{t_{n+0.5}} V(x,\tau)d\tau} e^{k \frac{\partial^i}{\partial x^i}} e^{\int_{t_n}^{t_{n+0.5}} V(x,\tau)d\tau}$ ao invés de $e^{0.5k \frac{\partial^i}{\partial x^i}} e^{\int_{t_n}^{t_{n+0.5}} V(x,\tau)d\tau} e^{0.5k \frac{\partial^i}{\partial x^i}}$. Como a integral no expoente é resolvida fazendo-se uma aproximação, é melhor que ela esteja em um intervalo de tamanho $k' = 0.5k$.¹⁹

¹⁹Há trabalhos em que se usa o método Splitting de Strang-Marchuck para se resolver a Equação de Schrödinger da Mecânica Quântica usando a parte potencial também nos intervalos de tamanho $k' = 0.5k$. Veja por exemplo a Ref. [59].

Capítulo 5

Método de Diferenças Finitas *Compact* com *Split-step* Aplicado à NLSE

5.1 Introdução

Neste capítulo vamos comparar dois métodos, o método de diferenças finitas com separação de passo (*Split-Step Finite Differences* - SSFD) com o *Método de diferenças finitas compacto com separação de passo* (Compact-SSFD). O método SSFD usa o Método *Split-Step* para separar as partes lineares e não lineares de uma equação diferencial, e depois resolve cada parte separadamente, sendo que a parte linear é resolvida usando Diferenças Finitas com aproximações simples. O método Compact-SSFD faz a mesma coisa mas resolve a parte linear da equação usando o *Método de Diferenças Finitas Compacto de Quarta Ordem*, já estudado na Seção 3.2 e com ordem de aproximação $O(k^2 + h^4)$. Este método foi proposto por Dehghan e Taleei [15], no qual nosso trabalho se baseia, e foi aplicado com sucesso à NLSE, mostrando ter melhor precisão e mesmo custo computacional. Neste capítulo vamos verificar alguns resultados obtidos no trabalho original e no próximo capítulo vamos mostrar os resultados de um trabalho desenvolvido por nós, onde aplicamos um método similar à Equação de Schrödinger Não Linear com Dispersão de Quarta Ordem.

5.2 Descrição Geral do Trabalho Original

O trabalho original trata-se de separar a parte linear da não-linear na NLSE usando o *splitting de Strang-Marchuk* e resolvê-las separadamente de tal forma que a parte não-linear (primeira e terceira exponencial da Eq. (4.118)) pode ser resolvida exatamente enquanto a parte linear será resolvida usando um *método de diferenças finitas compacto*.

Vamos tomar a NLSE escrita na forma (4.116) e aplicar o *Splitting de Strang-Marchuk*. De acordo com as Eqs. (4.99)-(4.101) teremos para a parte linear

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{L} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-0.5)k] \end{aligned} \quad (5.1)$$

enquanto para a parte não linear teremos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{N} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq (n-0.5)k \\ \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_3^{n-1}[\mathbf{X}, (n-1)k] \end{aligned} \quad (5.2)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_3^n(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{N} \vec{\psi}_3^n(\mathbf{X}, t), & (n-0.5)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_3^n[\mathbf{X}, (n-0.5)k] &= \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, nk] \end{aligned} \quad (5.3)$$

Durante a implementação, estas três equações serão resolvidas seguindo os seguintes passos:

(i) Resolve-se a parte não linear (5.3) “exatamente”:

$$\psi_3^n = e^{i\frac{k}{2}\gamma|\psi_3^{n-1}|^2} \psi_3^{n-1} \quad j = 1, \dots, N_x + 1. \quad (5.4)$$

(ii) Resolve-se a parte linear usando se o operador de diferenças finitas apropriado:

$$\psi_2^{n+1} = \mathbf{L} \psi_3^n \quad j = 2, \dots, N_x, \quad (5.5)$$

onde o operador \mathbf{L} vai depender do método de discretização que estivermos usando para a parte linear.

(iii) Resolve se a parte não linear (5.2) exatamente:

$$\psi_3^{n+1} \equiv \psi^{n+1} = e^{i\frac{k}{2}\gamma|\psi_2^{n+1}|^2} \psi_2^{n+1} \quad j = 1, \dots, N_x + 1. \quad (5.6)$$

Podemos observar que as partes não-lineares levam em conta todos os pontos da discretização espacial incluindo os pontos do contorno, enquanto a parte linear despreza os contornos. Isto é feito para evitar que os contornos gerem erros. É por isso que é usado o método matricial para a análise de estabilidade da parte linear. O *Splitting de Strang-Marchuk* usado aqui possui um erro $O(k^2)$ e foi provado ser estável enquanto o *Método Crank-Nicholson* possui erros $O(k^2 + h^2)$ e é incondicionalmente estável, consistente e consequentemente convergente.

5.3 Simulações

Escrevemos o algoritmo computacional para um único sóliton e para a colisão entre dois sólitons onde na parte linear usamos os coeficientes obtidos na Seção 3.1 para os métodos *Crank-Nicholson* e *diferenças finitas compacto*. Para um único sóliton vamos usar como perfil inicial de propagação a solução da Eq. (4.115):

$$\psi(x, t) = \text{sech}(x - 4t)e^{i(2x+t)}, \quad \text{com } \beta_2 = 1 \quad \text{e com } \gamma = 2 \quad (5.7)$$

no qual $t = 0$, e na simulação as condições de contorno serão em $[-20, 20]$.

Para a colisão entre dois sólitons, o perfil inicial de propagação é

$$\psi(x, t) = \text{sech}(x - 10 - 4t)e^{-i(2x-20-3t)} + \text{sech}(x + 10 + 4t)e^{i(2x+20+3t)}, \quad (5.8)$$

com $\beta_2 = -1$, $\gamma = -2$, $t = 0$ e condições de contorno em $[-40, 40]$. O algoritmo foi escrito na linguagem FORTRAN 90. No código a norma $I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx$ foi obtida fazendo a integração pela *Regra do Trapézio Simples*, enquanto a energia $I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} (\beta_2 |\partial_x \psi|^2 + \frac{\gamma}{2} |\psi|^4) dx$ foi obtida fazendo a

integração pela *Regra do Retângulo* e usando a derivada numérica $\partial_x \psi(x, t) = \frac{1}{2h}(\psi^{j+1, n} - \psi^{j-1, n})$, conforme foi feito pelos autores:

$$I_3 = h \sum_{j=1}^{nx} \left(\beta_2 \left| \frac{1}{2h} (\psi^{j+1, n} - \psi^{j-1, n}) \right|^2 + \frac{\gamma}{2} |\psi|^4 \right). \quad (5.9)$$

Na Fig. 5.1 podemos comparar as variações das normas e energias entre nosso algoritmo com os resultados dos autores.

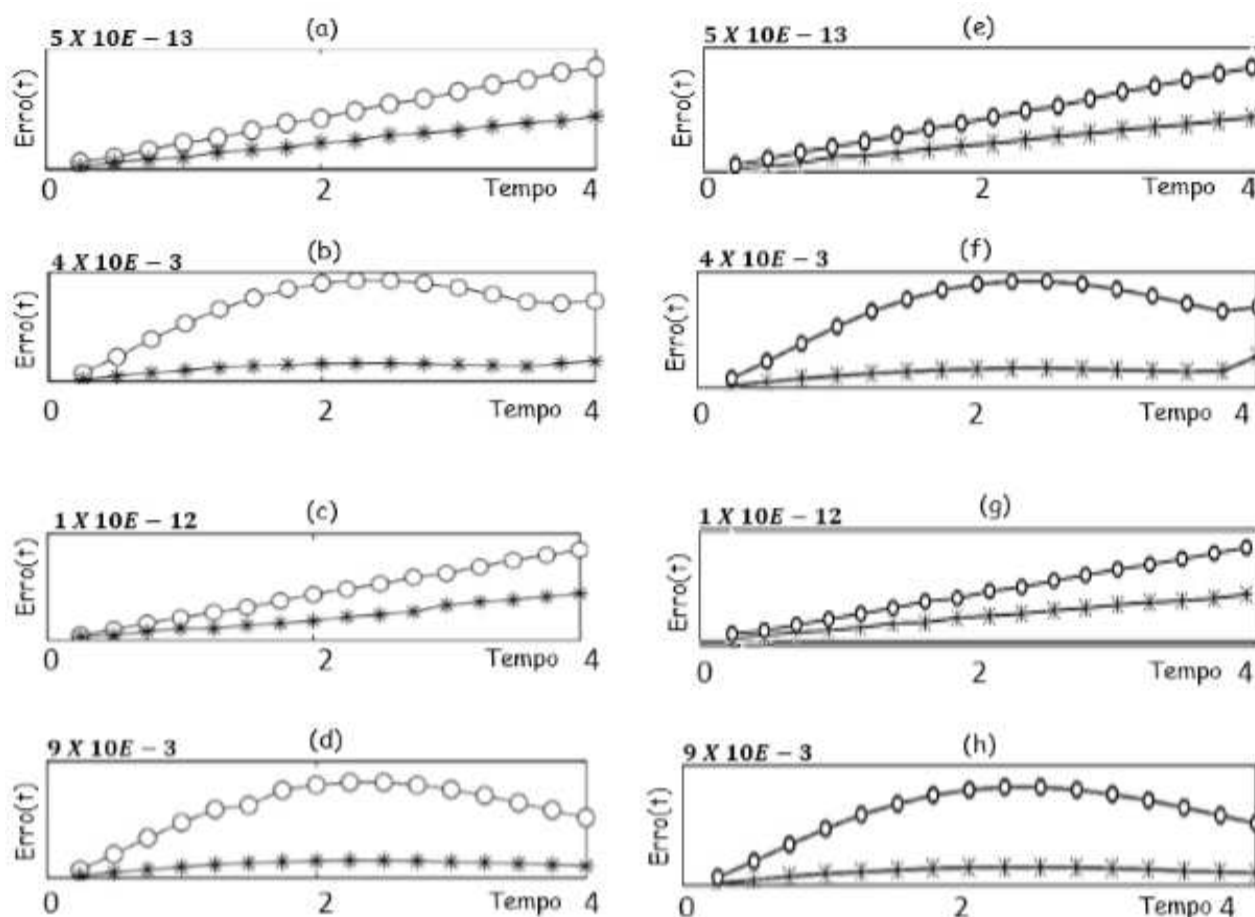


Figura 5.1: No lado esquerdo estão os resultados do trabalho original e no lado direito, nossos resultados. Os círculos representam o Método SSFD e os asteriscos representam Método Compact-SSFD. Nas Figuras a) e e) estão as normas para um único sóliton, enquanto nas Figuras c) e g) estão as normas para a colisão entre dois sólitons. Nas Figuras b) e f) estão as energias para um único sóliton enquanto nas Figuras d) e h) estão as energias para a colisão entre dois sólitons. Aqui foram usados $h = 0.1$ e $k = 0.01$, $NX = 400$, $NT = 400$, $TT = 4$, $L = 20$ (único sóliton) e $L = 40$ (colisão entre dois sólitons).

Na Tabela 5.1 comparamos nossos resultados com os dos autores para a *Norma máxima do erro* $\|\mathbf{L}\|_\infty$, e a *Norma 2 do erro* $\|\mathbf{L}\|_2$ definidas como

$$\|\mathbf{L}\|_\infty \equiv \max_j |\psi_A^j - \psi_E^j| \quad (5.10)$$

e

$$\|\mathbf{L}\|_2 \equiv \sqrt{h \sum_{j=1}^{NX} |\psi_A^j - \psi_E^j|^2}, \quad (5.11)$$

no qual ψ_E é a solução exata, enquanto ψ_A é a solução numérica.

ÚNICO SÓLITON				ÚNICO SÓLITON			
COMPACT SSFD	Tempo	L_∞	L_2	COMPACT SSFD	Tempo	L_∞	L_2
	0.5	1.939E-3	2.845E-3		0.5	1.939E-3	2.845E-3
	1.0	3.271E-3	5.672E-3		1.0	3.271E-3	5.672E-3
	2.0	7.848E-3	1.237E-2		2.0	7.848E-3	1.237E-2
	3.0	1.242E-2	1.969E-2		3.0	1.242E-2	1.970E-2
4.0	3.674E-2	3.662E-2	4.0	3.662E-2	3.674E-2		
SSFD	Tempo	L_∞	L_2	SSFD	Tempo	L_∞	L_2
	0.5	1.834E-2	2.635E-2		0.5	1.834E-2	2.635E-2
	1.0	3.708E-2	5.577E-2		1.0	3.708E-2	5.577E-2
	2.0	7.952E-2	1.248E-1		2.0	7.952E-2	1.248E-1
	3.0	1.235E-1	1.982E-1		3.0	1.235E-1	1.982E-1
4.0	1.661E-1	2.646E-1	4.0	1.660E-1	2.646E-1		
COLISÃO ENTRE 2 SÓLITONS				COLISÃO ENTRE 2 SÓLITONS			
COMPACT SSFD	Tempo	L_∞	L_2	COMPACT SSFD	Tempo	L_∞	L_2
	0.5	2.130E-3	3.927E-3		0.5	1.939E-3	4.024E-3
	1.0	3.721E-3	8.022E-3		1.0	3.721E-3	8.022E-3
	2.0	7.848E-3	1.749E-2		2.0	7.848E-3	1.750E-2
	3.0	1.230E-2	2.783E-2		3.0	1.230E-2	2.783E-2
4.0	1.646E-2	3.716E-2	4.0	1.644E-2	3.717E-2		
SSFD	Tempo	L_∞	L_2	SSFD	Tempo	L_∞	L_2
	0.5	1.834E-2	4.725E-2		0.5	1.834E-2	3.727E-2
	1.0	3.708E-2	7.887E-2		1.0	3.708E-2	7.887E-2
	2.0	7.952E-2	7.952E-2		2.0	7.952E-2	1.765E-1
	3.0	1.237E-1	1.237E-1		3.0	1.237E-1	2.803E-1
4.0	1.642E-1	3.741E-1	4.0	1.641E-1	3.741E-1		

Tabela 5.1: As duas tabelas do lado esquerdo mostram a Norma Máxima e Norma 2 dos erros obtidas no trabalho original, e as duas do lado direito mostram os resultados obtidos pelo nosso algoritmo. Na segunda tabela do trabalho original supomos que os valores que estão repetidos foram colocados por engano pelos autores.

Os perfis de propagação estão na Fig. 5.3. Podemos ver que a condição inicial proposta pelos autores para a colisão entre dois sólitons não descreve o choque entre eles e sim o afastamento. É provável que os autores tenham feito a simulação sem a colisão para visualizar a eficiência do método numérico testado. Escrevemos estas condições iniciais de forma que os sólitons realmente colidissem:

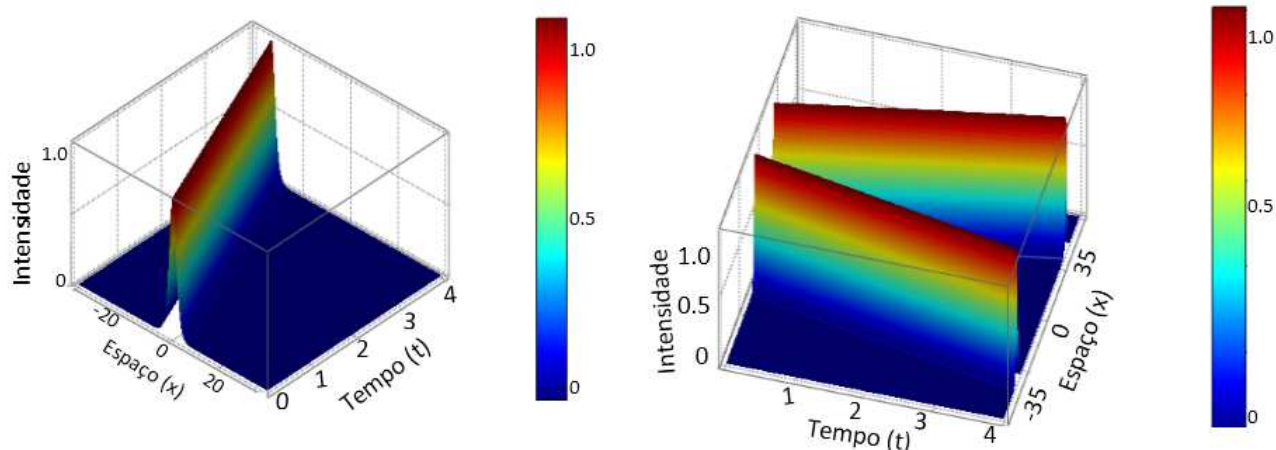


Figura 5.2: Perfis de propagação para um único sóliton e para dois sólitons. Na simulação para colisão entre dois sólitons os perfis estão se afastando um do outro. Supomos que caso os autores da Ref. [15] fizessem estes sólitons realmente colidirem ficaria difícil verificar as normas 2 e máxima do método devido à grandes oscilações na região da colisão.

$$\psi(x,t) = \operatorname{sech}(x + 10 - 4t)e^{-i(2x+20-3t)} + \operatorname{sech}(x - 10 + 4t)e^{i(2x-20+3t)}. \quad (5.12)$$

As normas estão na Tabela 5.2 e o perfil de propagação está na Fig. 5.3. Podemos ver que aproximadamente no tempo da colisão a solução exata diverge da solução numérica.

SSFD		
$h = 0.1; k = 0.01; L = 40; \beta_2 = -1; \gamma = -2 T = 4$		
Tempo	L_∞	L_2
0.5	1.834E-2	3.727E-2
1.0	3.708E-2	7.887E-2
2.0	8.708E-2	1.785E-1
3.0	1.021E+0	2.024E+0
4.0	1.055E+0	2.106E+0
NORMA FINAL: 8.082423619271140e-13		

COMPACT SSFD		
$h = 0.1; k = 0.01; L = 40; \beta_2 = -1; \gamma = -2 T = 4$		
Tempo	L_∞	L_2
0.5	1.939E-3	4.024R-3
1.0	3.728R-3	8.022E-3
2.0	2.388E-2	3.977E-2
3.0	8.988E-1	1.821E+0
4.0	9.066E-1	1.832E+0
NORMA FINAL: 5.933031843596837e-13		

Tabela 5.2: Tabelas com as normas Máxima e 2 para o caso em que dois sólitons realmente colidem.

Para ilustrar os efeitos das condições de contorno fizemos elas variarem de $[-16, 16]$ à $[-24, 24]$. Pelo fato da energia ser mais sensível para investigar a variação do erro, plotamos gráficos para as variações da energias de um único sóliton, que podem ser visualizados na Fig. 5.4.

Se formos contar da esquerda para à direita, cada uma das curvas que vão para cima representam as respectivas condições de contorno: $[-16, 16]$, $[-17, 17]$, $[-18, 18]$, ... $[-24, 24]$. Vemos que à

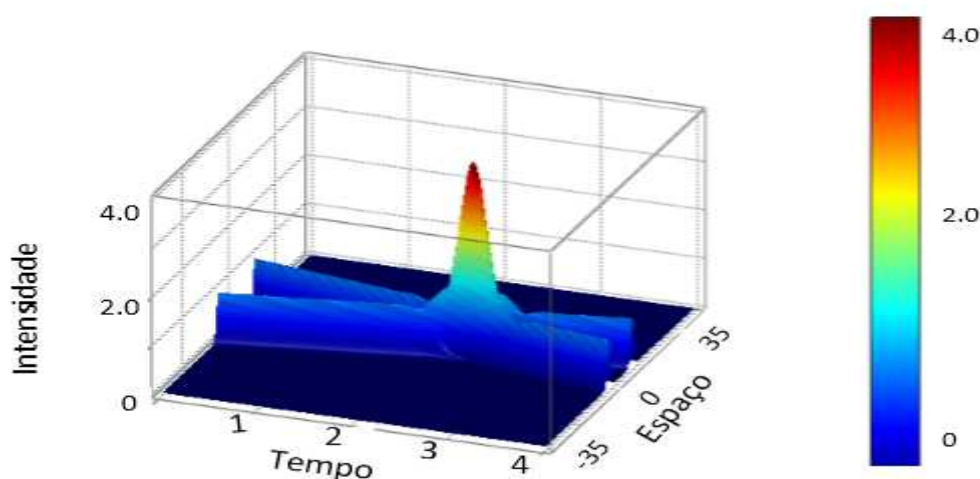


Figura 5.3: Simulação para colisão entre dois sólitons. É possível observar na Tabela 5.2 que a solução numérica irá divergir da solução analítica aproximadamente no local da colisão. Isto é aceitável devido as grandes oscilações que ocorrem nesta região.

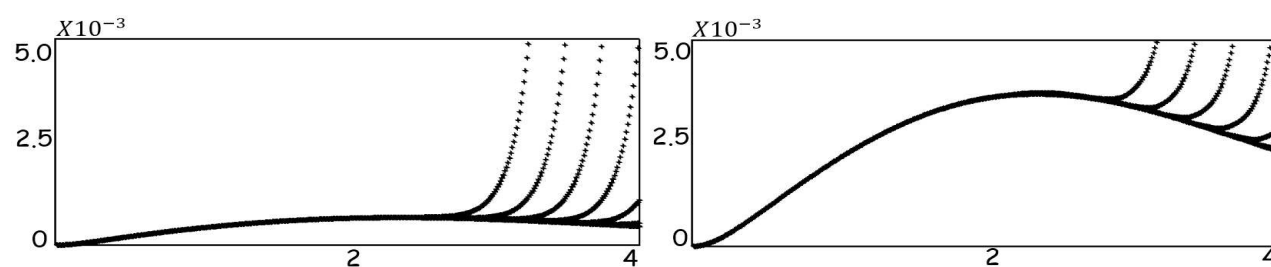


Figura 5.4: Variação da energia para um simples sóliton quando as condições de contorno variam de $[-16,16]$ à $[-24,24]$ para os métodos SSFD (lado esquerdo) e Compact-SSFD (lado direito).

medida que as condições de contorno se aproximam de $[-40,40]$ as curvas vão ficando cada vez mais parecidas, isto é, como as funções tendem à atenuar em $\pm\infty$, a variação das condições de contorno deixa de fazer diferença.

5.4 Outros Testes

No trabalho original os autores realizaram testes somente para $k = 10^{-2}$ e $h = 10^{-1}$. Não foi explicado o motivo mas é provável que seja porque o método *compact* possua aproximação $O(k^2 + h^4)$. Conforme já foi mencionado não há extamante um Número de Courant para o Método Crank-Nicholson embora muitos trabalhos têm sido feito para estipular um análogo.

Na Ref. [55] Mohtar fez uma revisão bibliográfica de alguns estudos relevantes voltados para encontrar um número de Courant para o método Cranck-Nicholson, mas estes trabalhos parecem

não terem chegado à uma conclusão definitiva. Veja o que ele relata:

$h = 0.1; L = 20;$			$\beta_2 = 1; \gamma = 2; T = 4.$		
SSFD			COMPACT SSFD		
$k = 0.1$			$k = 0.1$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.165E-1	2.468E-1	0.5	2.021E-1	2.302E-1
1.0	4.927E-1	5.640E-1	1.0	4.630E-1	5.289E-1
2.0	9.851E-1	1.309E+0	2.0	9.408E-1	1.249E+0
3.0	1.079E+0	1.775E+0	3.0	1.061E+0	1.723E+0
4.0	9.974E-1	1.922E+0	4.0	9.956E-1	1.883E+0
NORMA FINAL: 2.930988785010413E-014			NORMA FINAL: 9.769962616701378E-015		
$k = 0.01$			$k = 0.01$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	1.834E-2	2.635E-2	0.5	1.939E-3	2.845E-3
1.0	3.708E-2	5.577E-2	1.0	3.721E-3	5.672E-3
2.0	7.952E-2	1.248E-1	2.0	7.848E-3	1.237E-2
3.0	1.235E-1	1.982E-1	3.0	1.242E-2	1.970E-2
4.0	1.660E-1	2.646E-1	4.0	3.662E-2	3.674E-2
NORMA FINAL: 4.296563105299356E-013			NORMA FINAL: 2.218225603201063E-013		
$k = 0.001$			$k = 0.001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	1.656E-2	2.385E-2	0.5	1.137E-4	1.656E-4
1.0	3.354E-2	5.053E-2	1.0	2.167E-4	3.290E-4
2.0	7.187E-2	1.129E-1	2.0	4.555E-4	7.163E-4
3.0	1.116E-1	1.792E-1	3.0	7.211E-4	1.253E-3
4.0	1.499E-1	2.397E-1	4.0	3.662E-2	2.716E-2
NORMA FINAL: 5.682121440031551E-013			NORMA FINAL: 7.025491299827991E-013		
$k = 0.0001$			$k = 0.0001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	1.654E-2	2.382E-2	0.5	9.551E-5	1.388E-4
1.0	3.350E-2	5.048E-2	1.0	1.817E-4	2.756E-4
2.0	7.179E-2	1.128E-1	2.0	3.818E-4	6.002E-4
3.0	1.115E-1	1.790E-1	3.0	6.709E-4	1.086E-3
4.0	1.498E-1	2.394E-1	4.0	3.662E-2	2.716E-2
NORMA FINAL: 1.943201155540919E-011			NORMA FINAL: 1.450439768291290E-011		

Tabela 5.3: Normas Máxima e 2 para o caso de um único sóliton, com $h = 0.1$ e k variando de 0.1 à 0.0001.

“Smith [60] (...) rearranhou a equação diferencial e definiu um termo chamado $r = \frac{k}{h^2}$ (...), Smith recomendou $r = 1$ para uma uma solução precisa para o Método Crank-Nicholson. Ele não mostrou nenhuma base para esta recomendação. Allaire [61] nomeou o termo r de Smith como Número de Courant (...) Ele mostrou que o Crank-Nicholson e praticamente todos os métodos de

único passo possuem boa precisão numérica para $r > 1.335$. Jaluria e Torrance [62] se referiram ao Número de Courant de Allarie como Número de Froude. Estes autores sugeriram usar valores do Número de Froude < 0.5 (para estabilidade) embora valores menores dessem resultados mais precisos. Eles nunca deram nenhuma dica de que valores eram estes. Dhatt e Touzout [63] notaram que a precisão e estabilidade são assuntos separados e que a seleção do tamanho do passo no tempo deve ser guiado por ambos os critérios simultaneamente.”

Não encontramos nenhuma referência para a precisão do método *compact*.

$k = 0.1; L = 20;$			$\beta_2 = 1; \gamma = 2 T = 4$		
SSFD			COMPACT SSFD		
$h = 0.01$			$h = 0.01$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.023E-1	2.303E-1	0.5	2.022E-1	2.301E-1
1.0	4.631E-1	5.291E-1	1.0	4.628E-1	5.287E-1
2.0	9.419E-1	1.249E+0	2.0	9.414E-1	1.249E+0
3.0	1.062E+0	1.724E+0	3.0	1.062E+0	1.723E+0
4.0	9.958E-1	1.883E+0	4.0	9.957E-1	1.883E+0
NORMA FINAL: 2.930988785010413E-014			NORMA FINAL: 9.769962616701378E-015		
$h = 0.001$			$h = 0.001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.022E-1	2.301E-1	0.5	2.022E-1	2.301E-1
1.0	4.628E-1	5.287E-1	1.0	4.628E-1	5.287E-1
2.0	9.414E-1	1.249E+0	2.0	9.414E-1	1.249E+0
3.0	1.062E+0	1.723E+0	3.0	1.062E+0	1.723E+0
4.0	9.957E-1	1.883E+0	4.0	9.957E-1	1.883E+0
NORMA FINAL: 8.814216023722565E-011			NORMA FINAL: 9.028622294238176E-011		
$h = 0.0001$			$h = 0.0001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.022E-1	2.301E-1	0.5	2.022E-1	2.301E-1
1.0	4.628E-1	5.287E-1	1.0	4.628E-1	5.287E-1
2.0	9.414E-1	1.249E+0	2.0	9.414E-1	1.249E+0
3.0	1.062E+0	1.723E+0	3.0	1.062E+0	1.723E+0
4.0	9.957E-1	1.883E+0	4.0	9.957E-1	1.883E+0
NORMA FINAL: 1.834043983350853E-008			NORMA FINAL: 2.336260784829847E-008		

Tabela 5.4: Normas Máxima e 2 para o caso de um único sóliton, com $k = 0.1$ e h variando de 0.01 à 0.0001.

Nesta seção foram colocados os resultados de alguns testes que não foram feitos no trabalho original. Em um destes testes verificamos as normas quando k varia de 10^{-1} à 10^{-4} com h fixo em 10^{-1} . Depois mantemos k fixo em 10^{-1} e fizemos h variar de 10^{-2} à 10^{-4} . Os resultados estão nas

Tabelas 5.3 e 5.4.

Verificamos que a melhor precisão numérica para o Crank-Nicholson com h fixo em 0.1 está entre $k = 0.01$ e $k = 0.001$. Para $h = k = 0.1$ o Crank-Nicholson apresentou sua melhor norma conservada, mas a solução exata diverge da solução analítica. Observamos o mesmo fenômeno com os mesmos valores de k e h para o método compact. Mesmo considerando que esta etapa da simulação é um estudo não muito aprofundado sobre otimização, vemos que nossa simulação do Crank-Nicholson, pelo menos para este caso específico, não parece estar de acordo nem com as estimativas de Smith nem com as estimativas de Allaire. O método compact apresenta melhor precisão, pelo menos para os valores de k e h que testamos, quando $r = 1$.

Quando fixamos $k = 0.1$ e variamos h vemos que a solução numérica diverge drasticamente da solução analítica, embora as normas conservadas ainda apresentem valores satisfatórios. Para os valores maiores de h vemos inclusive que as normas 2 do método Crank-Nicholson converge para as normas 2 do método compact. O mesmo ocorre com as normas máximas. Isto pode ser um indício de que está ocorrendo o que Vesely chama marginalmente estável. Vesely relatou que este fenômeno ocorre quando $k \rightarrow \infty$ mas como há um fator $\frac{k}{h^2}$ multiplicando os autovalores da matriz de amplificação (caso realmente haja um número de Courant, e caso isso seja um bom critério para estimar este número), fazer $h \rightarrow 0$ talvez tenha o mesmo efeito de fazer $k \rightarrow \infty$. Observe que na Tabela 5.3, tivemos o mesmo problema de divergência mas com o método ainda permanecendo estável e conservando a norma.

Capítulo 6

Estudos do Método *Compact-SSFD* aplicado à *FODNLSE*

6.1 Descrição do Trabalho

Nosso trabalho é uma tentativa de aplicar o método *Compact-SSFD* à Equação de Schrödinger Não-Linear com Dispersão de Quarta Ordem

$$i\partial_t \psi + \beta_2 \partial_x^2 \psi - \beta_4 \partial_x^4 \psi + \gamma |\psi|^2 \psi = 0. \quad (6.1)$$

Ao aplicarmos o *Splitting de Strang-Marchuk* teremos três equações iguais às (4.99)- (4.101), porém com a parte linear escrita na forma

$$\frac{d\psi_2^n}{dt} = i\beta_2(t)\partial_x^2 \psi_2^n - i\beta_4(t)\partial_x^4 \psi_2^n, \quad (n-1)k < t \leq nk, \quad (6.2)$$

que será resolvida usando o *diferenças finitas*.

Na próxima seção deste capítulo mostramos como obter a equação de diferenças finitas para derivada quarta com aproximação de segunda ordem. Ao combinarmos esta equação com a equação de diferenças finitas para a derivada segunda, e depois aplicarmos o Crank-Nicholson teremos a Eq. (6.1) em diferenças finitas. Este método, que chamamos de *SSFD*, possui precisão numérica mais simples. Fizemos as simulações numéricas para ele para que pudéssemos comparar com os métodos *compact* que tentamos desenvolver posteriormente. Os resultados numéricos estão do lado esquerdo da Tabela 6.1.

Na seção seguinte desenvolvemos um método *compact* para a derivada quarta usando séries de Taylor. A equação de diferenças finitas tem precisão de ordem quarta e foi combinada com o método *compact* para a derivada segunda através de uma média. Não obtivemos nenhum resultado interessante nas simulações. Os resultados não foram colocados neste trabalho.

Na seção seguinte, como uma alternativa à implementação, testamos um *split-step* para a parte linear para que pudéssemos implementar as derivadas segundas e quartas separadamente, sem precisar fazer a média. Neste trabalho nos referimos a este método como SSFD com *split-step* para a parte linear (SSFDSSL). Verificamos que não haverá problemas se fizermos este tipo de implementação, isto é, o método propaga corretamente o perfil inicial, inclusive com precisão melhor do que o SSFD. Os resultados foram colocados na Tabela 6.1.

Combinamos finalmente o método SSFDSSL com o método *compact* obtido por séries de Taylor. Chamamos esta combinação de *compact* SSFDSSL. Os resultados dos testes estão na Tabela 6.2. Verificamos que embora o método *compact* SSFDSSL devolvesse melhores normas 2 e máxima em relação ao SSFDSSL, as normas conservadas eram piores.

Na conclusão levantamos algumas hipóteses sobre os possíveis motivos do método *compact* para a derivada quarta não funcionar corretamente, e alguns comentários sobre se é possível ou não obter métodos *compact* para este tipo de derivada. Discutiremos também porque o SSFDSSL parece ter melhor precisão do que o SSFD.

6.2 Dedução do Método Convencional para Dispersão de Quarta Ordem

Vamos usar a expansão (4.10) escrita na forma

$$\psi^{j+2,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-2,n} = 4\partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \frac{4}{3}\partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 + \frac{8}{45}\partial_x^6 \psi^{j,n} h^6 + \dots \quad (6.3)$$

e a expansão (4.4) escrita na forma

$$\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n} = \partial_x^2 \psi^{j,n} h^2 + \frac{1}{12}\partial_x^4 \psi^{j,n} h^4 + \frac{1}{360}\partial_x^6 \psi^{j,n} h^6 \dots \quad (6.4)$$

Um dos problemas que encontramos foi como implementar este método para uma equação que possui derivada segunda e derivada quarta. Quando implementamos o método de Numerov no capítulo 5, tomamos a equação da difusão $\frac{\partial \psi}{\partial t} = i\beta_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ e substituímos $\psi^{n,j}$ por $\frac{1}{12}[\psi^{n,j+1} + 10\psi^{n,j} + \psi^{n,j-1}]$ para obtermos:

$$\frac{1}{12} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^{n,j+1} + \psi^{n,j} + \psi^{n,j-1}) = i\beta_2 \frac{1}{12} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi^{n,j+1} + \psi^{n,j} + \psi^{n,j-1}) = \frac{1}{h^2} (\psi^{j+1,n} - 2\psi^{j,n} + \psi^{j-1,n}) + O(h^4) \quad (6.13)$$

Foi preciso de alguma forma combinar a equação acima com (6.11), para obter (6.6) com aproximação de ordem $O(h^4)$. A primeira tentativa foi somar as duas e fazer a média do lado esquerdo. Com isto obtemos a relação

$$\begin{aligned} \frac{1}{120} \partial_t (2\psi^{j+2,n} + 7\psi^{j+1,n} + 102\psi^{j,n} + 7\psi^{j-1,n} + 2\psi^{j-2,n}) &= \frac{i\beta_2(t)}{h^2} (\psi^{j,n} - 2\psi^{j+1,n} + \psi^{j+2,n}) \\ &- \frac{i\beta_4(t)}{h^4} (\psi^{j+2,n} - 4\psi^{j+1,n} + 6\psi^{j,n} - 4\psi^{j-1,n} + \psi^{j-2,n}) + O(h^4) \end{aligned} \quad (6.14)$$

Após usar o Crank-Nicholson na equação acima, fizemos as simulações numéricas para este método. A Ref. [18] destaca que soluções solitônicas para a FONLSE só podem ser encontradas numericamente, todavia a solução exata

$$\psi(x,t) = \sqrt{a} \operatorname{sech}^2 (bx) e^{iqt} \quad (6.15)$$

descreverá um sólon, desde que $a = 0.3$, $b = \frac{1}{\sqrt{20}}$ e $q = 0.16$. Esta solução foi encontrada em 1994 [64]. Em um outro trabalho de 2005 foi encontrada a seguinte solução solitônica:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{3\beta_2^2}{10\beta_4\gamma}} \operatorname{sech}^2 \left(\sqrt{\frac{\beta_2}{20\beta_4}} x \right) \exp \left(i \frac{4\beta_2^2}{25\beta_4} t \right) \quad (6.16)$$

com $\frac{\beta_2}{\beta_4} > 0$ [65]. Podemos ver que se usarmos a solução (6.16) com $\beta_2 = \beta_4 = \gamma = 1$, então $a = 0.3$, $b = \frac{1}{\sqrt{20}}$ e $q = 0.16$ na Eq. (6.15) o que nos garante que realmente estaremos propagando um sólon em nossas simulações. Usamos também $L = 26$ para garantir que os contornos estejam suficientemente longe do local da propagação (se colocarmos os contornos próximos do local da

propagação uma parte da solução pode causar grandes oscilações, fazendo com que as normas 2 e máxima sejam muito grandes).

O resultado não foi satisfatório. Com isto verificamos ou que o método *compact* não se adequa à equação ou não é conveniente tomar a média da forma em que fizemos. Uma alternativa para a implementação foi então usar um *split-step* na parte linear para separar as derivadas segundas e quartas. A descrição se encontra na próxima seção.

6.4 Implementação do Método Compact

No caso da NLSE a implementação era mais simples pois tínhamos somente a derivada segunda. Bastava substituir ψ por $\frac{1}{12}(\psi^{j+1} + 10\psi^j + \psi^{j-1})$ na derivada temporal da Equação da Difusão. No caso da FONLSE isto não é tão simples. Uma alternativa foi tentar aplicar o método *split-step* para a parte linear da FODNLSE com o objetivo de separar a derivada segunda da quarta, e depois aplicar o método compact apropriado para cada uma delas. Para verificar se funciona, tomamos primeiro o método convencional (6.6), separamos as partes linear e não linear, e depois separamos a parte linear em derivada segunda e derivada quarta. A separação em partes linear e não linear já foi discutida no capítulo anterior. A separação das derivadas segunda e quarta na parte linear foi feita da seguinte forma: Tomamos a Eq. (6.2) e , aplicando o *Splitting de Strang-Marchuk* teremos os subproblemas

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t) &= -i\beta_4 \partial_x^4 \vec{\psi}_1^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq (n-0.5)k \\ \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_3^{n-1}[\mathbf{X}, (n-1)k], \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t) &= i\beta_2 \partial_x^2 \vec{\psi}_2^n(\mathbf{X}, t), & (n-1)k < t \leq nk \\ \vec{\psi}_2^n[\mathbf{X}, (n-1)k] &= \vec{\psi}_1^n[\mathbf{X}, (n-0.5)k], \end{aligned} \quad (6.18)$$

fazemos um *split-step* estamos fazendo uma discretização, o que obviamente acarreta em um erro (que dependem de k).

$h = 0.1; L = 26;$			$\beta_2 = 1; \beta_4 = 1; \gamma = 1; T = 4.$		
SSFD			SSFDSSL		
$k = 0.1$			$k = 0.1$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	4.103E-5	1.001E-4	0.5	2.562E-5	8.706E-5
1.0	5.469E-5	1.481E-4	1.0	2.951E-5	9.861E-5
2.0	7.918E-5	1.940E-4	2.0	2.240E-5	9.046E-5
3.0	9.129E-5	2.283E-4	3.0	2.834E-5	1.027E-4
4.0	1.140E-4	2.781E-4	4.0	3.140E-5	1.067E-4
NORMA FINAL: 5.404565683875262E-13			NORMA FINAL: 9.072742557236779E-13		
$k = 0.01$			$k = 0.01$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	3.200E-5	8.666E-5	0.5	3.147E-5	8.601E-5
1.0	4.785E-5	1.323E-4	1.0	5.082E-5	1.309E-4
2.0	6.082E-5	1.718E-4	2.0	6.188E-5	1.702E-4
3.0	8.254E-5	2.078E-4	3.0	8.226E-5	2.058E-4
4.0	9.431E-5	2.517E-4	4.0	9.356E-5	2.498E-4
NORMA FINAL: 6.871836433219869E-12			NORMA FINAL: 2.607691840239568E-12		
$k = 0.001$			$k = 0.001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.900E-5	8.714E-5	0.5	2.855E-5	8.670E-5
1.0	5.266E-5	1.319E-4	1.0	4.937E-5	1.318E-4
2.0	6.362E-5	1.717E-4	2.0	6.362E-5	1.718E-4
3.0	8.627E-5	2.071E-4	3.0	8.317E-5	2.075E-4
4.0	9.805E-5	2.513E-4	4.0	9.753E-5	2.512E-4
NORMA FINAL: 7.474021401776554E-12			NORMA FINAL: 4.836131495267182E-13		
$k = 0.0001$			$k = 0.0001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	3.032E-5	8.707E-5	0.5	3.239E-5	8.696E-5
1.0	4.897E-5	1.319E-4	1.0	4.904E-5	1.319E-4
2.0	6.191E-5	1.716E-4	2.0	6.264E-5	1.717E-4
3.0	8.614E-5	2.074E-4	3.0	8.376E-5	2.073E-4
4.0	1.017E-4	2.514E-4	4.0	1.004E-4	2.514E-4
NORMA FINAL: 1.561244467040979E-10			NORMA FINAL: 5.896128030258296E-11		

Tabela 6.1: Normas Máxima e 2 para o caso de um único sóliton, com $h = 0.1$ e k variando de 0.1 à 0.0001.

Era de se esperar que o método SSFD tivesse precisão melhor pois nele o *split-step* foi aplicado somente uma vez para cada passo no tempo, enquanto para o SSFDSSL o *split-step* é aplicado duas vezes para cada passo no tempo. Um outro motivo que nos levou a crer que o SSFDSSL apresentaria

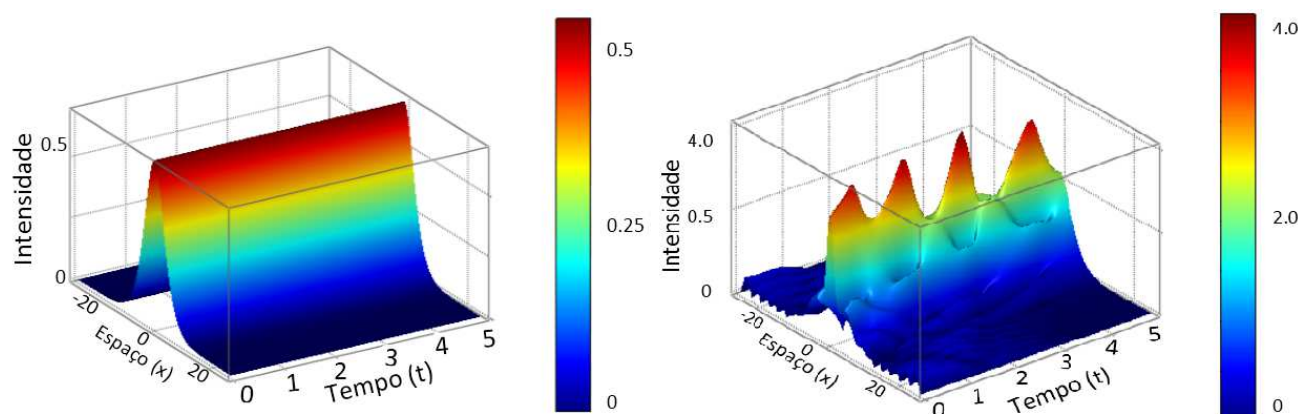


Figura 6.1: Na figura do lado esquerdo pode-se observar a propagação de um sóliton com condições iniciais dadas por (6.16), com $\beta_2 = 1$, $\beta_4 = 1$, $\gamma = 1$ e $L=26$. Na figura do lado direito multiplicamos esta condição inicial por 4.

menor precisão são os erros de arredondamento. Conforme já falamos, os erros de arredondamento resultam da incapacidade do computador armazenar todas as casas decimais. Ao se introduzir um *splitting* adicional, aumentamos a quantidade de cálculos que a máquina deve fazer, aumentando assim a quantidade arredondamento. Foi um tanto surpreendente observar que quando usamos o método *split-step* para a parte linear, a aproximação do método numérico foi mais precisa. Não temos ainda uma explicação razoável para isso. Em relação ao tempo computacional o SSFDSSL apresenta pior desempenho.

Para nos certificarmos que este método descreve corretamente a equação diferencial, comparamos o perfil de propagação com a propagação do método convencional, que devido a dedução ser mais simples e direta, tem, mais chances de convergir para a solução exata.¹ Os resultados desta comparação também estão na Tabela 6.1. Para nos certificarmos que o método SSFDSSL converge para a solução da equação diferencial fizemos a plotagem tanto do método convencional quanto do método SSFDSSL. Como condições iniciais usamos a Eq. (6.16), primeiro multiplicada por 1 e depois multiplicada por 4. Podemos ver pela Fig. (6.1) que no primeiro caso temos a propagação de um sóliton no estado fundamental e no segundo caso temos uma solução que oscila. Um dos motivos pelos quais multiplicamos a condição inicial por 4 é que durante os testes percebemos que

¹É fácil mostrar que o método convencional converge para a propagação correta, se fizermos a análise de estabilidade, a análise de consistência e depois usarmos o Teorema da Equivalência de Lax.

em alguns casos, quando o método numérico não está correto, o método propaga qualquer condição inicial, isto é se colocarmos como condição inicial $\psi(\mathbf{X},0) = x$ o perfil inicial irá se propagar sem modificar sua forma.

$h = 0.1; L = 26;$			$\beta_2 = 1; \beta_4 = 1; \gamma = 1; T = 4.$		
SSFDSSL			COMPACT SSFDSSL		
$k = 0.1$			$k = 0.1$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	3.147E-5	8.601E-5	0.5	4.921E-5	1.255E-4
1.0	5.082E-5	1.309E-4	1.0	6.511E-5	1.581E-4
2.0	6.188E-5	1.702E-4	2.0	6.976E-5	1.668E-4
3.0	8.266E-5	2.058E-4	3.0	6.888E-5	1.875E-4
4.0	9.356E-5	2.498E-4	4.0	8.514E-5	1.965E-4
NORMA FINAL: 2.607691840239568E-12			NORMA FINAL: 1.823385886723372E-11		
$k = 0.01$			$k = 0.01$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	3.147E-5	8.601E-5	0.5	2.405E-5	5.759E-5
1.0	5.082E-5	1.309E-4	1.0	2.470E-5	6.316E-5
2.0	6.188E-5	1.702E-4	2.0	2.170E-5	6.502E-5
3.0	8.226E-5	2.058E-4	3.0	2.225E-5	6.879E-5
4.0	9.356E-5	2.498E-4	4.0	2.519E-5	7.230E-5
NORMA FINAL: 2.607691840239568E-12			NORMA FINAL: 2.630606843467831E-11		
$k = 0.001$			$k = 0.001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	2.855E-5	8.670E-5	0.5	2.041E-5	5.550E-5
1.0	4.937E-5	1.318E-4	1.0	2.369E-5	6.441E-5
2.0	6.262E-5	1.718E-4	2.0	2.034E-5	6.346E-5
3.0	8.317E-5	2.075E-4	3.0	2.285E-5	6.877E-5
4.0	9.753E-5	2.512E-4	4.0	9.753E-5	2.512E-4
NORMA FINAL: 4.836131495267182E-13			NORMA FINAL: 5.976730221846083E-11		
$k = 0.0001$			$k = 0.0001$		
Tempo	L_∞	L_2	Tempo	L_∞	L_2
0.5	3.239E-5	8.696E-5	0.5	2.126E-5	5.618E-5
1.0	4.904E-5	1.319E-4	1.0	2.338E-5	6.472E-4
2.0	6.264E-5	1.717E-4	2.0	2.291E-5	6.457E-5
3.0	8.376E-5	2.073E-4	3.0	2.070E-5	6.830E-4
4.0	1.004E-4	2.514E-4	4.0	2.446E-5	7.332E-5
NORMA FINAL: 5.896128030258296E-11			NORMA FINAL: 1.045711462600233E-10		

Tabela 6.2: Normas Máxima e 2 para o caso de um único sóliton, com $h = 0.1$ e k variando de 0.1 à 0.0001.

É óbvio que isto não corresponde à teoria de sólitons. Desta forma, ao colocarmos uma condição inicial que oscila, a comparação fica mais fácil.

Em um outro teste comparamos o método Compact SSFDSSL com o SSFDSSL (Tabela 6.2). O motivo pelo qual comparamos ele com o SSFDSSL e não com o SSFD é o SSFD não contém *split-step* para a parte linear. Desta forma se o *split-step* para parte linear aumenta (ou diminui) a precisão numérica, então este aumento deve ocorrer tanto para o Compact SSFDSSL quanto para o SSFDSSL. Verificamos que apesar do método Compact SSFDSSL nos dar melhores normas máxima e normas 2, a norma conservada é pior do que a do método SSFDSSL. Desta forma o método compact que conseguimos desenvolver até aqui não parece ser apropriado.

6.5 Conclusão

Nesta seção faremos a análise dos resultados obtidos. Um resultado importante é que o método SSFDSSL funciona, pois além de propagar o pulso corretamente, não piora a precisão numérica. Com isso resolvemos o problema da implementação. Se futuramente conseguirmos um método *compact* para a derivada quarta, ele poderá tranquilamente ser implementado junto com o método *compact* para derivada segunda.

Em relação ao SSFDSSL, verificamos que este método apresenta uma precisão numérica maior. Um dos motivos para a melhor precisão numérica obtida talvez seja o tamanho do intervalo temporal. Ao se fazer um *split-step* para a parte linear, resolve-se as derivadas de quarta ordem em intervalos temporais de tamanho $k' = 0.5k$. Talvez isto ajude na precisão numérica. Obviamente, devido ao aumento da quantidade de cálculos a simulação computacional se torna mais lenta.

Para tentarmos compreender a ineficiência do nosso método *compact* para a derivada quarta, podemos voltar à demonstração do método de Numerov e do método Crank-Nicholson. Para estes dois métodos, mostramos que a eliminação dos termos de ordem mais altas pode ser feita usando-se tanto a própria equação diferencial quanto derivadas numéricas obtidas por séries de Taylor. Para o caso em que se usa série de Taylor, observamos que na obtenção do Crank-Nicholson, tomamos o termo $\frac{k^2}{2} \partial_t^2 \psi$ e fizemos a derivada primeira da derivada primeira. Quando demonstramos o método de Numerov tomamos o termo $\frac{h^2}{12} \partial_x^4 \psi$ e fizemos derivada segunda da derivada segunda. Para o problema que estamos tentando resolver agora parece não ser possível aplicarmos a mesma regra,

pois o próximo termo a ser truncado é uma derivada sexta, que obviamente não pode ser substituído por uma derivada quarta da derivada quarta.

Uma outra explicação possível poderia ser o fato de que em ambos os métodos *compact* (de Numerov e Crank-Nicholson) a própria equação diferencial pode ser usada para eliminar o termo de ordem mais alta da série de Taylor. No caso da FONLSE, isolar uma derivada para substituir no termos de ordem mais alta da série de Taylor não é tarefa fácil, pois além da FONLSE conter duas derivadas, há dois parâmetros diferentes β_2 e β_4 . Se os dois parâmetros fossem sempre igual à 1 isto facilitaria nosso trabalho. Sendo assim a eliminação deste termo através da equação diferencial parece não ser trivial. Tudo indica que métodos compact para derivada quarta não são fáceis de se obter.

Capítulo 7

Comentários Finais e Perspectivas

Em vista dos resultados que obtivemos, e das observações que fizemos no final deste último capítulo, parece que métodos *compact* para derivadas quartas para a HONLSE (se realmente forem possíveis) não são obtidos tão facilmente como no caso do método de Numerov ou do método Crank-Nicholson. Conforme já foi mencionado, estes dois métodos podem ser deduzidos usando se tanto a equação diferencial quanto aproximações em Taylor. Não sabemos exatamente quais das duas deduções são mais essenciais. Se é a substituição da equação diferencial no termo que queremos eliminar, a dedução pela série de Taylor ou se é necessário que os dois ocorram simultaneamente.

Em trabalhos futuros pretendemos verificar se métodos *compact* são obtidos para outros tipos de derivadas. Caso a eliminação de termos de ordens mais altas não seja possível através de séries de Taylor, um recurso que seria útil seria o método dos aproximantes de Padé que também é um método de interpolação por diferenças finitas.

Há observações que fizemos que podem ser usadas como ponto de partida para estudos mais aprofundados. As mais relevantes se encontram na subseção 4.2.4 sobretudo no que diz respeito à matriz de amplificação e seus autovetores. É preciso compreendermos melhor se os autovetores $\hat{\psi}_1, \hat{\psi}_2 \dots \hat{\psi}_{N_x+1}$ que são usados na expansão do vetor $\vec{\psi}(\mathbf{X}, t_{n+1})$ podem ser usados também como autovetores da matriz de amplificação conforme foi feito em nossas considerações. Na ocasião em que levantamos esta hipótese a única justificativa foi a relação $\psi_A = \psi_E - \varepsilon$. Mas poderíamos também reforçar esta hipótese dizendo que a matriz de amplificação é uma aproximação para uma matriz diagonal cujo os elementos da diagonal são $e^{\tilde{\omega}_{jk}}$. É obvio que a multiplicação desta matriz por

qualquer um dos vetores $\hat{\psi}_j$ resultará no próprio autovetor multiplicado pelo fator de amplificação. Além do mais estamos considerando que os autovetores $\hat{\psi}_j$ possuem uma única entrada não nula. Isto nos garante que eles sejam ortogonais entre si. Ainda sobre as observações que foram feitas na subseção 4.2.4 esperamos que a análise do fator de amplificação nos permita uma compreensão melhor de como o erro, quando escrito de forma explícita no argumento da exponencial, pode conduzir ao número de Courant. Em uma prévia revisão da literatura Mothar mostrou que as análises de erros e de estabilidade são estudadas aparentemente de forma independente. Contudo, ao exigirmos que $\max_j |e^{\tilde{\omega}_j}| \leq 1$ estamos impondo que $\max_j \text{Re}\{\omega_j\} \leq 0$. Porém a parte real de ω está relacionada somente aos erros, de forma que talvez possamos verificar melhor se há uma fórmula explícita que relacione erro e estabilidade. Se isto acontecer com alguma restrição, então será possível estipularmos números de Courant para otimização numérica, inclusive para métodos como o Cranck-Nicholson.

Referências Bibliográficas

- [1] A. M. Abourabia, K. M. Hassan, E. S. Selima, *The Derivation and Study of the Nonlinear Schrödinger Equation for Long Waves in Shallow Water Using the Reductive Perturbation and Complex Ansatz Methods*, Int. J. Nonlinear Si. **4**, v. 9, p. 430-443, 2010.
- [2] M. Colin, T. Colin, M. Ohta, *Stability of solitary waves for a system of nonlinear Schrödinger equations with three wave interaction*, Ann. de Inst. H. Poincaré **6**, v. 26, p. 2211-2226, 2009.
- [3] B. J. LeMesurier, *Dissipation at singularities of the nonlinear Schrödinger equation through limits of regularisations*, Physica D, **3-4**, v. 138, p. 334-343, 2000.
- [4] A. Gharaati, P. Elahi, S. Cari, *Propagation of Spatial Solitons with Nonlinear Kerr Effect in Thermal Medium*, Acta Phys. Pol. A, **5**, v. 112, p. 891-896, 2007.
- [5] J. Wheatley, D. S. Buchanan, G.W. Swift, A. Migliori, T. Hofler, *Nonlinear natural engine: Model for thermodynamic processes in mesoscale systems*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **23**, v. 82, p. 7805-7809, 1985.
- [6] X. Antoine, W. Bao, C.Besse, *Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equations*, Comput. Phys. Commun. **12**, v. 184, p. 2621-2633, 2013.
- [7] R. Killip, T. Oh, O. Pocovnicu, M. Visan, *Global well-posedness of the Gross-Pitaevskii and cubic-quintic nonlinear Schrödinger equations with non-vanishing boundary conditions*, Math. Res. Lett. **05**, v. 19, p. 969-986, 2011.

- [8] R. J. Dodd, C. W. Clark, K. Burnett, *Zero-Temperature, Mean-Field Theory of Atomic Bose-Einstein Condensates*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **4**, v. 101, p. 553-565, 1996.
- [9] V. V. Konotop, P. Pacciani, *Collapse of Solutions of the Nonlinear Schrödinger Equation with a Time-Dependent Nonlinearity: Application to Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **24**, v. 94, 2005.
- [10] M. Chen, J. M. Nash, C. E. Patton, *A numerical study of nonlinear Schrödinger equation solutions for microwave solitons in magnetic thin films*, J. Appl. Phys. **8**, v. 73, p. 3906-3909, 1993.
- [11] B. Bischof, A. N. Slavin, H. Benner, Y. Kivshar, *Generation of spin-wave dark solitons with phase engineering*, Phys. Rev. B, v. 71, p. 1-7, 2005.
- [12] Y. Kivshar, X. Yang, *Dynamics of dark solitons*, Chaos Soliton Fract. **8-9**, v. 4, p. 1745-1758, 1994.
- [13] M. Wu, B. A. Kalinikos, L. D. Carr, C. E. Patton, *Observation of spin wave soliton fractals in magnetic film active feedback rings*, Phys. Rev. Lett. **18**, v. 96, p. 187202, 2006.
- [14] H. Leblound, *Rigorous derivation of the NLS in magnetic films*, J. Phys. A - Math Gen. **45**, v. 34, p. 9687-9712, 2001.
- [15] M. Dehghan, A. Taleei, *A compact split-step finite difference method for solving the nonlinear Schrödinger equations with constant and variable coefficients*, Comput. Phys. Commun. v. 181, p. 43-51, 2010.
- [16] J. Yang, *Nonlinear Waves in Integrable and Nonintegrable Systems*, 1st Ed., SIAM, Philadelphia (2010).
- [17] S. L. Palacios, *Two simple ansätze for obtaining exact solutions of high dispersive nonlinear Schrödinger equations*, Chaos Soliton Fract. **1**, v. 19, p. 203-207, 2004.

- [18] Y. S. Kivshar, G. P. Agrawal, *Optical Solitons, From Fibers to Photonic Crystals*, 1th Ed. Academic Press (2001).
- [19] P. D. Green, D. Milovic, D. A. Lott, A. Biswas, *Optical Solitons with Higher Order Dispersion by Semi - Inverse Variational Principle*, Prog. Electromagn Res. v. 102, p. 337-350, 2010.
- [20] G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, 3th Ed., Academic Press (2001).
- [21] L. Calaça, A.T. Avelar, D. Bazeia, W.B. Cardoso, *Modulation of localized solutions for the Schrödinger equation with logarithm nonlinearity* Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. v. 19, p. 2928-2934, 2014.
- [22] L. Salasnich, W. B. Cardoso, B. A. Malomed, *Localized modes in quasi-two-dimensional Bose-Einstein condensates with spin-orbit and Rabi couplings* Phys. Rev. A, v. 90, p. 033629, 2014.
- [23] W. B. Cardoso, J. Zeng, A. T. Avelar, D. Bazeia, B. A. Malomed, *Bright solitons from the non-polynomial Schrödinger equation with inhomogeneous defocusing nonlinearities* Phys. Rev. E, v. 88, p. 025201, 2013.
- [24] W. Cardoso, A. Avelar, D. Bazeia, *Modulation of localized solutions in a system of two coupled nonlinear Schrödinger equations* Phys. Review. E, Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics (Online), v. 86, p. 027601, 2012.
- [25] W. Cardoso, A. Avelar, D. Bazeia, *Bright and dark solitons in a periodically attractive and expulsive potential with nonlinearities modulated in space and time* Nonlinear Anal. Real World Appl., v. 11, p. 4269-4274, 2010.
- [26] W. B. Cardoso, A. T. Avelar, D. Bazeia, M. S. Hussein, *Solitons of two-component Bose Einstein condensates modulated in space and time*, Phys. Lett. A, v. 374, p. 2356-2360, 2010.
- [27] A. T. Avelar, D. Bazeia, W. B. Cardoso, *Solitons with cubic and quintic nonlinearities modulated in space and time*, Phys. Review. E, v. 79, p. 025602(R), 2009.

- [28] B. A. Malomed, *Soliton Management in Periodic Systems*, 1th Ed., Springer Science & Business Media (2006).
- [29] Lloyd N. Trefethen, *Finite Difference and Spectral Methods for Ordinary and Partial Differential Equations (unpublished text)* , (livro não publicado, disponível em <http://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdetext.html>) (1994).
- [30] A. Biswas, D. Milovic, *Topological Solitons of the Nonlinear Schrödinger Equation with Fourth Order Dispersion*, Int. J. Theor. Phys. v. 48, p. 1104-1109 , 2009.
- [31] W. F Ames, *Numerical methods for partial differential equation*, 2nd Ed., Academic Press (1977).
- [32] Quing Han, *A Basic Course in Partial Differential Equations*, Ed. ilustrada, American Mathematical Soc. (2011).
- [33] K.Hoffmann, S. T. Chiang, *Computational Fluid Dynamics* , 4th Ed., EES (2000).
- [34] L.Debnath, T. Myint-U, *Linear Partial Differential Equation To Scientists And Engeneering* , 4th Ed. Birkhöuser (2007).
- [35] K. F. Riley, M. P. Hobson and S. J. Bence, *Mathematical Methods for Physics and Engineering* , 3th Ed., Cambridge University Press (2006).
- [36] M. H. Holmes *Introduction to numerical Methods And Differential Equations* , 1st Ed., Springer (2007).
- [37] J. D. Anderson *Computational Fluid Dynamics. The Basics With Applications* , McGraw-Hill (1995).
- [38] C. A. J. Fletcher , *Computational Techniches for Fluid Dynamics Vol. 2* , 4th Ed., Springer-Verlag (1987).

- [39] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, 7th Ed. John Wiley (2001).
- [40] A. Panajotovic, D. Milovic, A. Biswas, E. Zerrad, *Influence of Even-Order Dispersion on Super-Second Soliton Transmission Quality under Coherent Crosstalk*, Res. Lett. Opt. 2008.
- [41] A. V. Buryak, N. N. Akhmediev, *Stability Criterion for Stationary Bound States of Solitons With Radiationless Oscillation Tails*, Phys. Rev. E 1995.
- [42] A. B. Redondo, de Sterke C. Martijn, J.E. Sipe, T. F. Krauss, B. J. Eggleton, C. Husko, *Pure-quartic solitons*, Nat. Comm. v. 7, p. 10427, 2016.
- [43] Michael K. Ng. *Iterative Methods for Toeplitz Systems, Numerical mathematics and scientific computation*, Ed. Ilustrada, Oxford University Press (2004).
- [44] A. Q. M Khaliq, *Numerical Methods For Ordinary Differential Equations*, (tese de doutorado) (1983).
- [45] R. H. Pletcher, J. C. Tannehill, D. Anderson *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, 3th Ed., CRC Press (1997).
- [46] C. A. Moura, C. S. Kubrusly *The Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Condition*, 1th Ed., Springer (2013).
- [47] J.W. Thomas *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, Vol. 22 de Texts in Applied Mathematics, Ed. Ilustrada, Springer Science and Business Media, (2013).
- [48] D. J. Duffy *Finite Difference Methods in Financial Engineering A Partial Differential Equation Approach*, John Wiley Sons Ltd (2006).
- [49] S. Perlis *Theory of Matrices*, 2th Ed., Courier Corporation (1991).
- [50] J. J. Sakurai, J. Napolitano *Modern Quantum Mechanics*, 2th Ed., Editora Pearson (2013).
- [51] F. J. Vesely, *Computational Physics A Introduction*, 1st Ed., Plenum Press (1994).

- [52] M. J. Clark *Numerical Methods of Reactor Analysis Nuclear Science and Technology, a Series of Monographs and Tesis*, 1th Ed., Elsevier (2012).
- [53] T. A. Cheema *Higher-Order Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations* (tese de doutorado) (1997).
- [54] H. P. Langtangen, *Computational Partial Differential Equations Numerical Methods and Diffpack Programming*, 2nd Edition, Springer (2002).
- [55] R. Mohtar L. Segerlind, *Accuracy-Based Time Step Criteria for Solving Parabolic Equations, The IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, v. 75, p. 153-163, 1995.
- [56] D. R. Durran, *Numerical Methods for Fluid Dynamics With Applications to Geophysics*, 2nd Ed., Springer (2010).
- [57] R. J. LeVeque *Numerical Methods for Conservation Laws*, 2nd Ed., Birkhauser (1992).
- [58] I. Faragó, *Numerical Treatment of Linear Parabolic Problems* (tese de doutorado) (2008).
- [59] P. Bader, S. Blanes, F. Casas, *Solving the Schrödinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with complex coefficients*, J. Chem. Phys. v. 139, p. 124117, 2013.
- [60] G.D. Smith, *Numerical Solutions of Partial Differential Equations, Finite Difference Methods*, Oxford University Press (1985).
- [61] P.E. Allaire, *Basics of the finite element method, in Solid Mechanics, Heat Transfer and Fluid Mechanics*, Wm. C. Brown Publishers (1985).
- [62] Y. Jaluria and K. Torrance, *Computational Heat Transfer*, Hemisphere Pub. Co. (1986).
- [63] G. Dhatt and G. Touzot, *The Finite Element Method Displayed*, John Wiley Sons (1984).
- [64] M. Karlsson, A. Höök, *Soliton-like pulses governed by fourth order dispersion in optical fibers*, Math. Opt. Commun. **4-6**, v. 104, p. 303, 1994.

-
- [65] A. M. Wazwaz, *Exact solutions for the fourth order nonlinear Schrodinger equations with a cubic and a power law nonlinearities*, Math. Comput. Modelling, **7-8**, v. 43, p. 802-808, 2006.
- [66] P. S. Maji, P. R. Chaudhuri, *A new design for all-normal near zero dispersion photonic crystal fiber with selective liquid infiltration for broadband supercontinuum generation at 1.55 μm* , Journal of Photonics, 2014.
- [67] I. Farago *Numerical Analysis and Its Applications, Third International Conference, Revised Selected Papers*, Springer (2004).