

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO CUALITATIVO DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN NO-LINEAL DE SCHRÖDINGER CON FRECUENCIA CRÍTICA

PROYECTO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERO
MATEMÁTICO

ROBERTO JAIME CARRASCO BETANCOURT

rocajabe@gmail.com

Director: DR. JUAN RICARDO MAYORGA ZAMBRANO

jrmayorgaz@gmail.com

Codirector: DR. MARCO VINICIO CALAHORRANO RECALDE

marco.calahorrano@epn.edu.ec

QUITO, FEBRERO 2016

DECLARACIÓN

Yo, ROBERTO JAIME CARRASCO BETANCOURT, declaro bajo juramento que el trabajo aquí escrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración no cedo mis derechos de propiedad intelectual, correspondientes a este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su reglamento y por la normatividad institucional vigente.

ROBERTO JAIME CARRASCO BETANCOURT

CERTIFICACIÓN

Certificamos que el presente trabajo fue desarrollado por ROBERTO JAIME CARRASCO BETANCOURT , bajo nuestra supervisión

Dr. JUAN RICARDO MAYORGA ZAMBRANO

Dr. MARCO VINICIO

CALAHORRANO RECALDE

Director del Proyecto

Codirector del Proyecto

AGRADECIMIENTOS

TODA MI VIDA BUSQUÉ A DIOS. LO BUSQUÉ EN LA RELIGIÓN, LAS ESCRITURAS, LA FILOSOFÍA, LAS MATEMÁTICAS Y VOLVÍ A EMPEZAR DE NUEVO DESDE CERO. EN MI BÚSQUEDA ENTENDÍ QUE DIOS SE ENCUENTRA EN EL FONDO DE UN CORAZÓN QUEBRANTADO, LLENO DE GRATITUD Y DISPUESTO A SER GUIADO POR SU ESPÍRITU. HOY VUELVO A CONFIRMAR MI FE EN ÉL Y COMPRENDÍ QUE SU LENGUAJE SON LAS MATEMÁTICAS.

En primer lugar quiero agradecer a DIOS, EL ETERNO PADRE: Sin Su guía y gracia no habría terminado este trabajo.

Gracias a mi familia: Mami, Marce, Cris, Andrés y Coqui; por molestarme tanto para que termine este proyecto y aguantar mi mal humor en todo este tiempo. Ahora ya no tengo excusa para comportarme mal. A todos ustedes los llevo siempre en mi corazón y son parte de mi motor para seguir adelante. Los admiro y presumo de ustedes cada vez que puedo. Gracias también a mi tío Lucio Betancourt por todo el apoyo que me ha dado.

Muchas gracias al Mate Juanito por acceder a dirigir este trabajo, por su enorme paciencia, haber sacrificado su tiempo por mí, su apoyo incondicional, su sentimiento de padre al buscarme cuando no tenía motivación para avanzar en este proyecto y por confiar en mí cuando ni siquiera yo lo hacía. Lo considero un amigo, un maestro, un faro a las naciones, una persona extraordinaria y el modelo del matemático en el que me quiero convertir. A usted Mate Juanito, muchas gracias por todo. “De grande quiero ser como usted”.

Muchas gracias al Mate Calahorrano por ayudarme en todo este tiempo, por reprendermme cada vez que me veía y por estar pendiente de la culminación de este proyecto. Muchas gracias por su tiempo y entusiasmo.

Gracias a todas las personas que me han dado su cariño, me han ofrecido su apoyo y han estado pendientes de mí. A unos por los ánimos que me dieron y a otros por “pasar de mí” y dejarme en paz. Evidentemente en este proyecto están mencionadas todas las personas que son; pero no son todos los que están. No menciono a cada uno porque me olvidaré de alguien y le faltaré al respeto; pero puedes estar seguro que si alguna vez te hice parte de manera directa o indirecta de este trabajo, entonces mi gratitud está contigo también.

Finalmente, agradezco a todas las personas que no creyeron en mí. Fueron un pilar importante y se los agradezco mucho.

DEDICATORIA

AL TODOPODEROSO Y ETERNO, QUIEN CON SU INFINITA GRACIA Y BONDAD ME HA PERMITIDO VER SUS GRANDIOSAS MARAVILLAS Y ME HA HECHO PARTÍCIPE DE FORTALECER MI TESTIMONIO QUE ÉL, BENDITO SEA, RIGE ESTE UNIVERSO CON JUSTICIA Y PODER ABSOLUTOS. A ÉL, TODO MI RESPETO, TODA MI ADMIRACIÓN, TODO MI LOOR.

Una vez leí la siguiente dedicatoria “El presente trabajo es una obra de ficción y por lo tanto no está dedicada a nadie” (El Cartero, Charles Bukowski). Esta dedicación me perturbó mucho ya que a pesar que el autor realizó un trabajo de ficción, no tener a quien dedicarlo, o no querer hacerlo, resulta para mí muy triste, ya que no tiene sentido alcanzar metas si no tienes con quien compartir esas alegrías.

En mi caso, deseo dedicar esto también a mi adorada madre: Luz.

Gracias mami por todo el apoyo en toda mi vida, sobre todo en este tiempo tan difícil para mí. Gracias por el amor, la paciencia, las mandadas al demonio, las risas y reprimendas; y porque de alguna forma te sientes “orgullosa” de esta imitación de hijo que tienes.
Por favor, nunca te mueras.

Para ti, TE AMO. :)

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 2. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS	7
2.1. Espacios de Lebesgue	7
2.2. Espacios de Sobolev	10
2.3. Algunos tópicos del Análisis no-lineal para problemas elípticos	12
2.3.1. Derivada de Fréchet	12
2.3.2. Condición de Palais Smale	13
2.3.3. Categoría de Lusternik - Schnirelmann	15
2.4. Métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales	17
2.4.1. Introducción	17
2.4.2. Métodos de Runge-Kutta para la solución de Ecuaciones diferenciales	18
2.4.3. Método del disparo para problemas con condiciones de frontera	19
2.4.4. SCILAB	20
CAPÍTULO 3. UNA INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA	22
3.1. Definiciones de la Mecánica Cuántica	22
3.1.1. Experimento de la Doble Rendija	23
3.1.2. El Efecto Fotoeléctrico	26
3.1.3. La Dualidad Onda-partícula	27
3.2. El Principio de Incertidumbre de Heisenberg	27
3.3. Principio de Superposición	28
3.4. Sistemas Semiclásicos	29
3.5. La Ecuación de Schrödinger	30
3.6. Postulados de la Mecánica Cuántica	31
CAPÍTULO 4. MULTIPLICIDAD Y CONCENTRACIÓN DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER NO LINEAL CON FRECUENCIA CRÍTICA	33
4.1. Límites para los valores críticos	38
4.2. Perfiles asintóticos y fenómeno de concentración	38
4.3. Comportamiento asintótico en la frontera	40
CAPÍTULO 5. ESTUDIO NUMÉRICO DEL COMPORTAMIENTO CUALITATIVO DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN NO-LINEAL DE SCHRÖDINGER CON FRECUENCIA CRÍTICA	41
5.1. Introducción a las experimentaciones preliminares	43
5.2. Experimentaciones con frecuencia no crítica	44
5.3. Experimentaciones con frecuencia crítica	46
5.4. Análisis de Resultados	48
CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	57
6.1. Conclusiones	57
6.2. Recomendaciones	58

APÉNDICE A. TÓPICOS DEL ANÁLISIS FUNCIONAL	59
APÉNDICE B. TÓPICOS DE ALGUNOS MÉTODOS TOPOLÓGICOS DE ANÁLISIS NO LINEAL PARA PROBLEMAS ELÍPTICOS	63
APÉNDICE C. TABLA DE SOLUCIONES ENCONTRADAS EN LA EXPERIMENTACIÓN	65

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 3.1. Esquema para constatar el experimento de la doble rendija. Fuente [31]	23
FIGURA 3.2. Experimento con proyectiles macroscópicos. Fuente [31]	24
FIGURA 3.3. Experimento con Ondas. Fuente [31]	25
FIGURA 3.4. Experimento con Electrones. Fuente [31]	26
FIGURA 5.1. Experimentos con potencial tipo mollifier	45
FIGURA 5.2. Una solución del problema límite	47
FIGURA 5.3. Gráfico de distancias para 7 máximos locales	49
FIGURA 5.4. Gráfico de distancias para 8 máximos locales	50
FIGURA 5.5. Gráfico de distancias para 10 máximos locales	51
FIGURA 5.6. Gráfico de distancias para 11 máximos locales	52
FIGURA 5.7. Gráfico de distancias para 12 máximos locales	53
FIGURA 5.8. Gráfico de distancias para 15 máximos locales	54
FIGURA 5.9. Gráfico de distancias para 16 máximos locales	55
FIGURA 5.10. Gráfico comparativo entre dos soluciones encontradas cuando se tienen 17 máximos locales	56
FIGURA 5.11. Gráfico comparativo entre dos soluciones encontradas cuando se tienen 18 máximos locales	56
FIGURA C.1. Experimento con $\varepsilon = 0,915$	69
FIGURA C.2. Experimento con $\varepsilon = 0,910$	69
FIGURA C.3. Experimento con $\varepsilon = 0,885$	70
FIGURA C.4. Experimento con $\varepsilon = 0,880$	70
FIGURA C.5. Experimento con $\varepsilon = 0,875$	71
FIGURA C.6. Experimento con $\varepsilon = 0,850$	71
FIGURA C.7. Experimento con $\varepsilon = 0,800$	72
FIGURA C.8. Experimento con $\varepsilon = 0,805$	72
FIGURA C.9. Experimento con $\varepsilon = 0,795$	73
FIGURA C.10. Experimento con $\varepsilon = 0,810$	73

ÍNDICE DE CUADROS

TABLA 5.1. Problema Original con potencial tipo mollifier	45
TABLA 5.2. Problema Límite con potencial tipo mollifier	46
TABLA 5.3. Problema Límite	47
TABLA 5.4. Problema Original	48
TABLA 5.5. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 7 máximos locales	49
TABLA 5.6. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 8 máximos locales	50
TABLA 5.7. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 10 máximos locales	51
TABLA 5.8. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 11 máximos locales	52
TABLA 5.9. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 12 máximos locales	53
TABLA 5.10. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 15 máximos locales	54
TABLA 5.11. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 16 máximos locales	55
TABLA 6.1. Tabla de contraste	58
TABLA C.1. Problema Original	65
TABLA C.2. Problema Original	66
TABLA C.3. Problema Original	67
TABLA C.4. Problema Original	68

RESUMEN

Este documento contiene resultados de experimentos matemáticos sobre el comportamiento cualitativo de soluciones de la ecuación no-lineal de Schrödinger:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1)$$

donde el potencial verifica:

(V1) V es una función continua no negativa sobre \mathbb{R}^N ;

(V2) $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$;

(V3) $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ es conexo y tiene frontera suave.

La condición (V3) es referida como “frecuencia crítica”, pues el comportamiento cualitativo de las soluciones de la ecuación (1) cambia drásticamente respecto al caso no crítico:

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > 0$$

En este contexto, en [6], BYEON & WANG muestran que para el caso crítico la situación cambia drásticamente dado que $V(x)$ depende del comportamiento local de $V(\cdot)$ cerca de su mínimo global.

En el caso que $\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > E$, los valores máximos de las soluciones están acotadas inferiormente por cero.

Además, estudiaremos la relación que existe entre la ecuación (1) y la correspondiente ecuación límite, detallada en [14] y [6]:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (2)$$

Nuestro objetivo es comprobar experimentalmente que a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, soluciones del problema (1), vía reescalamiento, se aproximan a soluciones de la ecuación (2); resultado que fue probado por FELMER & MAYORGA en [14].

En cuanto a la construcción del código numérico, nos hemos basado en [37] y [1], que describen variaciones del Método del Disparo para problemas no lineales con condiciones de frontera y como abordar estos problemas dependiendo de las condiciones de cada problema. Estos documentos sirvieron como guía al momento de realizar los experimentos correspondientes a las ecuaciones (1) y (2). Nuestro trabajo incorpora el Método del Disparo para aproximarse a la solución mediante la determinación de ángulos de tiro, mientras que estos ángulos son corregidos por medio del método de la secante y la aproximación a la solución se lo hace por medio del Método de Runge - Kutta de cuarto orden para dimensión 1.

RESUMEN

This document contains results of mathematical experiments on the qualitative behavior of solutions of the nonlinear Schrödinger equation:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{in } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{as } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3)$$

where the potential verifies :

- **(V1)** V is a continuous non-negative function on \mathbb{R}^N ;
- **(V2)** $V(x) \rightarrow \infty$ as $|x| \rightarrow \infty$;
- **(V3)** $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ is connected and smooth.

The condition (V3) it is referred to as “critical frequency”, because the solutions of the qualitative behavior of the (3) has a drastically changed in the no critical case:

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > 0$$

In this context, in [6], BYEON & WANG show that for the critical case changes dramatically because $V(x)$ depends of the local qualitative behavior of $V(\cdot)$ near its global minimum.

In the case $\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > E$, the maximum values of the solutions are bounded away from zero.

In addition , we will study the relationship between the equation (3) and the corresponding limit equation detailed in [14] y [6]:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{in } \Omega; \\ u = 0, & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (4)$$

Our objective is to check experimentally that as $\varepsilon \rightarrow 0$, solutions of the problem (3), via rescaling , approximate solutions of the equation (4); result was tested by FELMER & MAYORGA in [14].

As for the construction of the numerical code , we have relied in [37] y [1]. This documents describe variations of the Shooting Method for nonlinear problems with boundary conditions and how to address these problems depending on the conditions of each problem. These documents served as a guide when we have made the experiments corresponding to equations (3) and (4). Our work incorporates the Shooting Method to approximate the solution by determining shooting angles , while these angles are corrected by the Secant Method and approach to the solution makes it by the Runge - Kutta Method for Dimension 1 .

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

El estudio matemático y cualitativo de la Ecuación no-lineal de Schrödinger es un problema abordado desde varias perspectivas, ya que dependiendo de las condiciones del potencial, esta ecuación puede tener o no solución; y en caso afirmativo, interesa la unicidad o multiplicidad. En este contexto, estudiar las condiciones de este potencial y determinar la existencia o no de soluciones de la Ecuación no-lineal de Schrödinger se ha convertido en un problema de gran interés en el último medio siglo, motivados por el desarrollo computacional y las técnicas de modelamiento numérico matemático que han ayudado a simular soluciones y comprender, desde una perspectiva general, el comportamiento de la Ecuación no-lineal de Schrödinger.

La tarea principal de este trabajo ha sido estudiar de manera cualitativa el comportamiento de la siguiente Ecuación no-lineal de Schrödinger con frecuencia crítica:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1.1)$$

donde el potencial $V(\cdot)$ verifica:

- (V1) V es una función continua no negativa sobre \mathbb{R}^N ;
- (V2) $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$;
- (V3) $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ es conexo y tiene frontera suave.

con su problema límite:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.2)$$

El estudio matemático sobre multiplicidad de soluciones y su comportamiento cualitativo fue realizado en detalle por FELMER & MAYORGA en [14]. A grosso modo, el teorema principal de FELMER - MAYORGA muestra que para el caso general del problema (1.1) en \mathbb{R}^N , se cumple que:

- i) El funcional asociado a la ecuación (1.1) tiene una infinidad de puntos críticos de una sucesión de soluciones de la ecuación (1.1),
- ii) a medida que $\varepsilon \downarrow 0$, los puntos del funcional asociado a la ecuación (1.1) convergen a soluciones de la ecuación (1.2); y
- iii) las soluciones presentan un decaimiento exponencial fuera del conjunto donde el potencial se anula.

Este Teorema muestra resultados sobre la existencia de soluciones infinitas respecto a las ecuaciones (1.1) y (1.2). Más aún, se muestra que estas soluciones están relacionadas entre sí por medio de la “sub-convergencia débil” a partir de un re-escalamiento de las soluciones de estos dos problemas. Además estas soluciones presentan un fenómeno de concentración respecto al conjunto en el que se está analizando estas ecuaciones; dado que fuera de este conjunto las soluciones decaen exponencialmente a medida que el valor de ε tiende a cero.

En estos términos, estudiar el comportamiento cualitativo de las ecuaciones (1.1) y (1.2) es importante en el sentido de comprender los conceptos topológicos antes de hacer cualquier experimentación; ya que es necesario comprender cabalmente los conceptos del análisis matemático utilizados para encontrar las soluciones de los problemas antes mencionados; y estos conceptos traspasarlos a experimentos coherentes y apegados a la matemática detrás de todas estas demostraciones. Finalmente, a lo largo de este trabajo hemos buscado varias estrategias para poder plasmar experimentalmente lo que se muestra en los teoremas correspondientes a la existencia y multiplicidad de soluciones; y es en virtud de estos que realizamos modificaciones a varios métodos numéricos clásicos para encontrar las soluciones asociadas a (1.1) y (1.2).

Hemos decidido seguir un orden lógico para poder presentar al lector una mejor comprensión de este trabajo.

Descripción del Capítulo 2

En el Capítulo 2 se presentan los resultados más importantes y relevantes que engloban los conceptos matemáticos básicos para la comprensión de este documento. Comenzamos mencionando el problema que deseamos estudiar desde una perspectiva cualitativa, para lo cual son necesarios varios conceptos topológicos que son los ingredientes para encontrar soluciones a nuestros problemas.

En la Sección 2.1 hacemos una breve mención de los espacios de Lebesgue y mencionamos formalmente varios teoremas importantes como el teorema de convergencia dominada para $L^1(\Omega)$ y $L^p(\Omega)$, teoremas de densidad respecto a varios espacios de funciones y hacemos una introducción breve a las funciones a soporte compacto.

En la Sección 2.2 introducimos el concepto de los espacios de Sobolev; mencionamos un teorema de densidad de las funciones continuas en estos espacios y un ejemplo que nos ayuda a comprender de mejor manera la conexión entre los espacios de Sobolev, los espacios de Lebesgue y el concepto de ecuaciones diferenciales.

La Sección 2.3 hace mención a algunos tópicos del análisis no lineal para problemas elípticos, en el que empezamos con la definición de la derivada de Fréchet y definiciones básicas de derivación de una aplicación continua. Introducimos brevemente el concepto de una sucesión de Palis - Smale y hablamos también de la condición de Palis-Smale. Finalmente, mencionamos la Categoría de Lusternik - Schnirelmann que permite demostrar la multiplicidad de soluciones de los problemas (1.1) y (1.2); para lo cual fue necesario comprender el concepto de Género de

Krasnoselsky y qué papel juega.

En la Sección 2.4 enunciamos los conceptos básicos respecto a los métodos numéricos para la solución de las ecuaciones diferenciales, donde abordamos el método general de Runge - Kutta para la solución de las ecuaciones diferenciales, el método del disparo para problemas no-lineales y una breve explicación del software que utilizamos para realizar los experimentos.

Descripción del Capítulo 3

En el Capítulo 3 se presenta un breve resumen sobre Mecánica Cuántica. La Sección 3.1 está dedicada a las definiciones de la Mecánica Cuántica, así como una breve descripción del experimento de la doble rendija, el efecto fotoeléctrico y la dualidad onda-partícula.

En la Sección 3.2 se presenta el Principio de Incertidumbre de Heisenberg, mientras que en la Sección 3.3 se muestra el Principio de Superposición y en la Sección 3.4 mencionamos los sistemas semiclásicos.

En la Sección 3.5 se describe a la Ecuación de Schrödinger y en la Sección 3.6 se hace una mención de los postulados de la Mecánica Cuántica desde un punto de vista matemático

Descripción del Capítulo 4

El Capítulo 4 se enlazan todos los conceptos mencionados en los anteriores capítulos y constituye la base teórica que sustenten los experimentos. Este capítulo resume el artículo [14], el mismo que muestra la relación que tienen las ecuaciones (1.1) y (1.2); así como detalla de manera formal y rigurosa la existencia y multiplicidad de soluciones de los problemas anteriormente mencionados; además de contener las demostraciones que han sido omitas en este documento; debido a que las demostraciones de muchos de ellos es bastante técnica. Este capítulo aborda de manera general los problemas (1.1) y (1.2) y mencionamos los teoremas y lemas que son los pilares principales sobre los que se fundamentan nuestros experimentos.

Adicionalmente, se mencionan los conceptos de frecuencia crítica, criterio de subconvergencia, se exponen varios ejemplos con variantes en los enfoques para resolver matemáticamente la Ecuación no-lineal de Schrödinger con frecuencia crítica, re-escalamiento, límites para los valores críticos, perfiles asintóticos, fenómenos de concentración y comportamiento asintótico en la frontera de los problemas antes mencionados.

Como complemento, anexamos el enunciado del teorema más importante de [14]:

Teorema 1.1. *Consideremos que las condiciones (V1) – (V3) se cumplen, que $N \geq 3$ y $1 < p < \frac{N+2}{N-2}$; por lo tanto se tiene:*

- i) Dado $\varepsilon > 0$, el funcional J_ε , correspondiente a la ecuación (1.1), posee una infinidad de puntos críticos $\{\widehat{w}_{k,\varepsilon}\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M_\varepsilon$.*

ii) El funcional límite J , correspondiente a la ecuación (1.2), posee infinitos puntos críticos $\{\widehat{w}_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M$.

iii) Dado $k \in \mathbb{N}$, los valores críticos satisfacen:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} J_\varepsilon(\widehat{w}_{k,\varepsilon}) = J(\widehat{w}_k). \quad (1.3)$$

iv) Dado $\delta, C, c > 0$ existe ε_0 tal que:

$$|\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| < C \exp\left\{-\frac{c}{\varepsilon} \text{dist}(x, \Omega^\delta)\right\}, \quad \text{donde } \Omega^\delta = \{x \in \mathbb{R}^N : \text{dist}(x, \Omega) < \delta\}. \quad (1.4)$$

v) En el límite de Ω , las funciones $\widehat{w}_{k,\varepsilon}$ verifican

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \max_{x \in \partial\Omega} |\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| = 0. \quad (1.5)$$

Descripción del Capítulo 5

En el Capítulo 5 se muestran los resultados obtenidos de la experimentación realizada para dimensión 1 de los problemas (1.1) y (1.2); los mismos que para este caso particular se escriben como sigue:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 v'' - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0; \\ v(-3) = v(3) = 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

asociado a su problema límite:

$$\begin{cases} u'' + |u|^{p-1}u = 0; \\ u(-2) = u(2) = 0. \end{cases} \quad (1.7)$$

El potencial que utilizamos para la experimentación es el siguiente:

$$V(x) = \begin{cases} \exp(-4 - |x|^2) - 1 & \text{si } x < -2 \\ 0 & \text{si } x \in [-2, 2] \\ \exp(-4 - |x|^2) - 1 & \text{si } x > 2 \end{cases} \quad (1.8)$$

Donde hemos fijado como $p = 2$.

Se constata la convergencia de soluciones mediante un método numérico híbrido entre el Método del Disparo no lineal y el método Runge Kutta 4. Estos resultados tienen que ver con la sub-convergencia entre soluciones, las mismas que fueron discriminadas por el número de máximos locales encontrados para determinado valor de ε . Para "buscar estas soluciones" se tuvo que variar los ángulos de tiro del Método del Disparo y luego comparar cada experimento respecto al último encontrado y determinar la distancia que existe entre estas dos soluciones.

Descripción del Capítulo 6

Aquí se presentan las Conclusiones y Recomendaciones pertinentes a este trabajo.

Capítulo 2

FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS

La siguiente presentación no es exhaustiva ni autocontenida; pues suponemos que el lector está familiarizado con conceptos básicos del Análisis Funcional. Si el lector desea profundizar el estudio, recomendamos [4], [23], [21] y [22]. Hemos resumido los conceptos mínimos necesarios para comprender el contenido del Teorema 1.1, que permite realizar la experimentación numérica.

Nos interesa estudiar, desde una perspectiva experimental, el problema:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.1)$$

donde se asume que el potencial $V(\cdot)$ satisface:

(V1) V es una función continua no negativa sobre \mathbb{R}^N ,

(V2) $V \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$,

(V3) $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ es conexo y tiene frontera suave.

Como fue mostrado por FELMER & MAYORGA en [14], el problema límite asociado a (2.1) es:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.2)$$

Para tener una comprensión cabal, son necesarios varios conceptos del Análisis Funcional como son los espacios de Lebesgue, espacios de Sobolev, conceptos de continuidad, funciones Lipchitz y algunos conceptos de Análisis No-lineal.

2.1. Espacios de Lebesgue

Para el desarrollo de este apartado, nos hemos basado principalmente en [3], [8], [4] y [2].

Desde sus comienzos, una de las primeras motivaciones para el desarrollo del Análisis Matemático fueron ecuaciones diferenciales que modelan fenómenos físicos. Este apogeo duró casi un siglo; y permitió extender los conceptos a ecuaciones integrales y ecuaciones íntegro diferenciales. En este contexto, es natural preguntarse qué es un espacio funcional; para lo cual recordaremos que un espacio funcional no es otra cosa que un espacio vectorial cuyos vectores son funciones.

Lebesgue, con la definición de su integral, hace varios estudios y contribuciones respecto a la teoría de la medida, la probabilidad, el análisis de Fourier y el

cálculo de las primitivas. Adicionalmente, se definen los espacios de Lebesgue que son ideales para definir otros espacios funcionales como los espacios de Lorentz; además de poseer propiedades interesantes y aplicaciones numerosas.

En esta sección se introducen formalmente los espacios de Lebesgue. Para definirlos es necesario el concepto de medida, que se presenta brevemente en el Apéndice A; o en [8] y [20] con mayor detalle.

Sea $A \subseteq \mathbb{R}$ un conjunto medible, entonces la medida de Lebesgue de A se notará como $|A|$.

Sean $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ y $1 \leq p < \infty$. Se define,

$$L^p(\Omega) = [f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}/f \text{ medible y } |f|^p \in L^1(\Omega)],$$

y se nota

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{1/p}.$$

En [4] se muestra que $\|\cdot\|_{L^p(\Omega)}$ es una norma.

Si $p = \infty$, se define

$$L^\infty(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} / \|f\|_{L^\infty(\Omega)} < \infty\},$$

y existe $c > 0$ tal que:

$$f \text{ es medible y } |f(x)| \leq c \text{ en c.t.p } \Omega.$$

Se denota:

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} = \inf \{c \in \mathbb{R} : |f(x)| \leq c \text{ c.t.p } x \in \Omega\}.$$

Las propiedades más importantes de los espacios de Lebesgue se resumen en el siguiente teorema, [4, cap IV]:

Teorema 2.1. *Sea $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ un conjunto abierto. Entonces:*

- (a) *Si $1 \leq p < \infty$, entonces $L^p(\Omega)$ es un espacio de Banach.*
- (b) *Si $1 \leq p < \infty$, entonces $L^p(\Omega)$ es un espacio de reflexivo.*
- (c) *Si $1 \leq p < \infty$, entonces $L^p(\Omega)$ es separable.*

Los siguientes teoremas son muy importantes para nuestro estudio, por lo cual se ha hecho una mención de los mismos omitiendo sus demostraciones.

Teorema 2.2. [4] **Teorema de convergencia dominada para L^1 :** Sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de funciones de L^1 tal que:

- (a) $f_n(x) \rightarrow f(x)$, c.t.p de Ω .
- (b) Existe una función $g \in L^1$ tal que para cada n , $|f_n(x)| \leq g(x)$ en c.t.p de Ω ; entonces $f \in L^1$ y $\|f_n - f\|_{L^1(\Omega)} \rightarrow 0$.

El teorema anterior menciona que si tenemos una sucesión $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que converja a f y si existe una función $g \in L^1$ que domina a todas las $f_n, n \in \mathbb{N}$, entonces la sucesión $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en norma L^1 .

Teorema 2.3. [4] **Teorema de convergencia dominada para L^p :** Sea $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ una sucesión de funciones en L^p tal que $\|f_n - f\| \rightarrow 0$. Entonces existe un sucesión $(f_{n_k})_{n \in \mathbb{N}}$ y una función $h \in L^p$ tal que:

- (a) $f_{n_k} \rightarrow f(x)$, c.t.p en Ω .
- (b) $|f_{n_k}(x)| \leq h(x)$, $\forall k$ c.t.p en Ω .

El teorema recientemente enunciado es una generalización del Teorema 2.2 para L^p .

Sea Ω un abierto en \mathbb{R}^d . Recordemos que $C(\Omega)$ denota el espacio de las funciones continuas sobre Ω , $C^k(\Omega)$ es el espacio de las funciones k veces diferenciables con continuidad sobre Ω . Se tiene por tanto que:

$$C^\infty(\Omega) = \bigcap_{k \in \mathbb{N}} C^k(\Omega)$$

Por $C_o(\Omega)$ se denota es el espacio de las funciones u continuas sobre Ω que se anulan fuera de un conjunto compacto $K \subset \Omega$. Se tiene

$$C_o^k(\Omega) = C^k(\Omega) \cap C_o(\Omega)$$

$$C_o^\infty(\Omega) = C^\infty(\Omega) \cap C_o(\Omega)$$

$C_o^\infty(\Omega)$ es el espacio de funciones $u \in C^\infty(\Omega)$ a soporte compacto sobre Ω ; es decir, que su soporte

$$\text{supp}(u) = \overline{\{x \in \Omega / u(x) \neq 0\}}$$

es compacto.

Teorema 2.4. [4] *El espacio $C_o(\Omega)$ es denso en $L^1(\Omega)$; es decir:*

$$\forall f \in L^1(\Omega), \forall \varepsilon > 0, \exists f_1 \in C_c(\Omega) \text{ tal que } \|f - f_1\|_1 < \varepsilon$$

Corolario 2.1. [4] *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ un abierto, entonces $C_o^\infty(\Omega)$ es denso en $L^p(\Omega)$ para cada $1 \leq p < \infty$.*

2.2. Espacios de Sobolev

De manera general, los problemas de contorno no son fáciles de resolver; y es por esta razón que se crearon los espacios de Sobolev que están dotados de una norma L^p , que en su afán de resolver los problemas de contorno, cambian la integración por derivación con el fin de bajar una dimensión a la ecuación diferencial y dar una solución débil a estos problemas. Es decir, los espacios de Sobolev pueden definirse como el conjunto de clases de funciones que tienen derivadas débiles, quienes toman a la integración como derivación para bajar la dimensión del problema de contorno.

Para fijar ideas, decimos que una ecuación diferencial es una ecuación de la forma:

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^m u}{\partial^{k_1} x_1 \partial^{k_2} x_2 \dots \partial^{k_n} x_n}\right) = 0.$$

donde $k_i, \forall i = 1, 2, \dots, n$ son enteros no negativos tales que: $k_1 + k_2 + \dots + k_n = m$. Además, se dice que una Ecuación Diferencial (ED) es lineal si ésta es lineal respecto a la función buscada y todas sus derivadas que forman parte de la ecuación son lineales; en caso contrario se llama no lineal. Por ejemplo, una solución clásica de la ecuación anterior es una función $u = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ lo “suficientemente regular” que satisface esta ecuación completamente.

Ejemplo 2.1. [35] Encontrar la solución $u = u(x, y)$ de la ecuación:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0.$$

Sea $v = \frac{\partial u}{\partial y} \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial x} = 0$ y por lo tanto $v = \varphi(y)$.

Integrando esta función con respecto a y se tiene:

$$u(x, y) = \int \varphi(y) dy + g(x) \quad \text{siendo } g(x) \text{ arbitraria.}$$

Además, dado que $\varphi(y)$ es una función arbitraria, entonces la integral también es una función arbitraria a la que llamaremos $f(y)$. En consecuencia, la solución general requerida son $f(y)$ y $g(x)$ tal que $u(x, y) = f(y) + g(x)$.

En la Física Matemática, las ED son de gran utilidad y generalmente se las utiliza para describir fenómenos naturales. En particular, se utilizan ED de segundo orden para describir ecuaciones de onda; como por ejemplo la Ecuación de Schrödinger. Si tomamos esta ecuación independiente del tiempo, la ecuación resultante forma parte de los problemas elípticos. Existe una basta literatura dedicada a este tipo de problemas, entre los que recomendamos [2], [17] y [9].

Sean $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un conjunto abierto y $1 \leq p \leq \infty$
El espacio de Sobolev $W^{1,p}(\Omega)$ se define como las funciones $u \in L^p(\Omega)$ para las

cuales existen $g_i \in L^p(\Omega)$, con $i = 1, \dots, d$ tales que

$$\int_{\Omega} u \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = - \int_{\Omega} g_i \varphi, \quad \forall \varphi \in C_c^\infty(\Omega), \quad \forall i = 1, \dots, d.$$

Además, para $W^{1,p}$ se tiene por notación

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = g_i, \quad \nabla u = \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_d} \right).$$

$W^{1,p}$ está provisto de la norma

$$\|u\|_{W^{1,p}} = \|u\|_{L^p(\Omega)} + \sum_{i=1}^d \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)}.$$

o por la norma equivalente

$$\left(\|u\|_{L^p}^p + \sum_{i=1}^d \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}.$$

Cuando $p = 2$, notaremos $H^1(\Omega) = W^{1,2}$, que está dotado del producto escalar:

$$\langle u, v \rangle_{H^1} = \langle u, v \rangle_{L^2} + \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right)_{L^2(\Omega)}.$$

Recordemos que si tenemos que $1 \leq p < \infty$ y $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ un conjunto abierto, entonces el espacio de Sobolev $W_0^{1,p}(\Omega)$ es la clausura o adherencia cierre de $C_o^\infty(\Omega)$ en $W^{1,p}(\Omega)$. Notaremos como $H_0^1(\Omega) = W_0^{1,2}(\Omega)$.

Teorema 2.5. [4] *El subespacio $C^\infty(\Omega) \cap W^{k,p}(\Omega)$ es denso en $W^{k,p}(\Omega)$.*

Teorema 2.6. [4] *El espacio $C_o^\infty(\Omega)$ es denso en $L^p(\Omega)$ para cada $p, 1 \leq p < \infty$.*

En consecuencia, tenemos la siguiente implicación:

$$C_o^\infty(\Omega) \subseteq W^{1,p}(\Omega) \subseteq L^p(\Omega).$$

Con el fin de mostrar la conexión entre los espacios de Sobolev y las ecuaciones diferenciales, presentamos el siguiente ejemplo:

Ejemplo 2.2. [4] Deseamos resolver el siguiente problema:

$$\begin{cases} u'' + u = f, & \text{en } \Omega = (0, 1); \\ u(0) = u(1) = 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Una solución débil de la ecuación (2.3) es una función $u \in H_0^1(\Omega)$ que verifica:

$$\int_{\Omega} u'v' + \int_{\Omega} uv = \int_{\Omega} fv \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (2.4)$$

No es fácil verificar que una solución clásica es una solución débil del problema. En consecuencia, lo que debemos encontrar es una solución débil. La siguiente es una proposición demostrada en [4], la cual dice que para cada $f \in L^2$, existe $u \in H_0^1(\Omega)$ única solución de (2.4). Además, u viene dada por:

$$\min_{v \in H_0^1} \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} (v'^2 + v^2) - \int_{\Omega} f v \right\}.$$

que es llamado el Principio de Dirichlet.

Notemos en primer lugar que si $f \in L^2$ y si $u \in H_0^1(\Omega)$ verifica (2.3), entonces $u \in H^2(\Omega)$. A esto se refiere como un resultado de regularidad.

Este método se adapta a una gran variedad de problemas. Es importante mencionar que es esencial precisar bien el espacio funcional en el cual se trabaja.

2.3. Algunos tópicos del Análisis no-lineal para problemas elípticos

El cálculo variacional se centra en encontrar puntos máximos, mínimos o puntos críticos de los problemas en general. El problema más conocido es el de la braquistocrona propuesto por Bernoulli en 1696, que constituyó un reto para los matemáticos de la época. Además de este problema existen otros en los que se debe encontrar puntos máximos, mínimos o de ensilladura como las geodésicas en el plano, el principio de Fermat, el principio de Dirichlet, el problema de la catenaria, el principio de mínima acción, etc.

Para la realización de los siguientes apartados nos hemos basado en [2], [10], [9], [17], [13] y [23] para describir algunos tópicos importantes, definiciones y teoremas que nos encaminan a entender los cimientos de los problemas que tratamos.

2.3.1. Derivada de Fréchet

Para poder encontrar estos puntos críticos, si hablamos del conjunto de los números reales \mathbb{R} , es suficiente con que la función sea continua y derivable. Para el caso general, el concepto de derivación es más fuerte y para nuestro caso, derivaremos en espacios de Banach.

Sea X, Y dos espacios de Banach y $L(X, Y)$ el espacio de las aplicaciones lineales continuas desde X a Y . Bajo la norma inducida:

$$\|A\|_{L(X, Y)} = \sup\{\|A x\|_Y : \|x\|_X \leq 1\}, \quad A \in L(X, Y),$$

$L(X, Y)$ es un espacio de Banach. Si $U \subset X$ es un conjunto abierto, $C(U, Y)$ denota el espacio de las aplicaciones continuas $f : U \rightarrow Y$.

Se dice que $f : U \rightarrow Y$ es Fréchet diferenciable en $u \in U$ con derivada $df(u) \in$

$L(X, Y)$ si

$$f(u+h) = f(u) + df(u)[h] + o(\|h\|), \quad \text{cuando } h \rightarrow 0.$$

f se dice que es diferenciable en U si es diferenciable para cada punto en $u \in U$.

El teorema siguiente es preliminar para introducir el teorema de la Inversión local.

Teorema 2.7. *Sea $f \in C(U, Y)$, $u^* \in U$ y $v^* = f(u^*) \in Y$. Diremos que f es localmente invertible en u^* si existe vecindades U^* de u^* y V^* de v^* y una aplicación $g \in C(V^*, U^*)$ tal que:*

$$g(f(u)) = u, \quad \forall u \in U^*. \quad f(g(v)) = v, \quad \forall v \in V^*.$$

A la aplicación g lo denotaremos como f^{-1} .

Teorema 2.8. Inversión Local: *Suponga que $f \in C^1(U, Y)$ y que $df(u^*)$ es invertible, en el sentido de y una aplicación en $L(X, Y)$, entonces f es localmente invertible en u^* , f^{-1} es de clase C^1 y*

$$df^{-1}(v) = (df(u))^{-1}, \quad \forall v \in V^*, \quad \text{donde } u = f^{-1}(v)$$

Más aún, si $f \in C^k(U, Y)$ entonces f^{-1} pertenece a la clase C^k .

Sea E un espacio de Banach. Un funcional sobre E es una aplicación continua tal que $J: E \rightarrow \mathbb{R}$. En adelante, asumiremos que J es Fréchet diferenciable en $u \in E$ con derivada $J'(u) \in L(E, \mathbb{R})$.

Sea $J \in C^1(E, \mathbb{R})$. Si E es un espacio de Hilbert, por el teorema de Riesz sabemos que existe una única función $J'(u) \in E$ tal que

$$(J'(u)|v) = dJ(u)[v], \quad \forall v \in E.$$

A $J'(u)$ se le llama gradiente y lo notaremos como $\nabla J(u)$. Si $J'(u) = 0$, entonces diremos el u es un punto crítico.

Sea $J: M \subset E \rightarrow \mathbb{R}$ y $a \in \mathbb{R}$. El conjunto

$$M^a = \{u \in M : J(u) \leq a\}.$$

es un "subnivel" de J sobre M .

2.3.2. Condición de Palais Smale

Una sucesión $u_n \in M$ se dice que es una sucesión de Palais-Smale sobre M si $J(u_n)$ es acotado y $\nabla_M J(u_n) \rightarrow 0$. Si $J(u_n) \rightarrow c$, la sucesión de Palais-Smale se llamará sucesión PS_c .

En consecuencia, J cumple con la condición de Palais-Smale (o PS_c) sobre M , si para cada sucesión de Palais Smale (o PS_c), se tiene una subsucesión convergente.

De manera más general, supongamos que M es una variedad, que $J : M \rightarrow \mathbb{R}$ es una función de clase C^1 y se cumplen que $M_a = J^{-1}]-\infty, a]$, $K_c = J^{-1}(c)$; entonces el conjunto de todos los puntos críticos se denota como K . Además, se tomarán las definiciones del Teorema A.2 enunciado en el Apéndice A para una mejor comprensión.

La condición de Palais-Smale generalizada se cumple cuando las siguientes condiciones se satisfacen:

- (PSG1) Para algún $a \in \mathbb{R}$ que se encuentra en el interior del conjunto de los valores regulares de J , existe $\varepsilon > 0$ tal que $M_{a+\varepsilon}$ se “deforma” en $M_{a-\varepsilon}$.
- (PSG2) Para cualquier punto crítico de J , $c \in \mathbb{R}$ y cualquier vecindad U de K_c , existe $\varepsilon > 0$ tal que $M_{c+\varepsilon} - U$ se “deforma” en $M_{c-\varepsilon}$.
- (PSG3) Para $a > \sup(J(K))$, M se “deforma” en M_a .

Para abordar el problema de encontrar soluciones a Ecuaciones Diferenciales Parciales Elípticas, existen algunos métodos clásicos; entre los cuales se pueden diferenciar principalmente los métodos topológicos (véase en el Apéndice B) y métodos variacionales.

El siguiente teorema es importante para definir la existencia de un mínimo local.

Teorema 2.9. *Sea $J \in C^{1,1}(E, \mathbb{R})$ y suponga que J está acotado por abajo sobre M y satisface $(PS)_m$ donde:*

$$m := \inf_{u \in M} J(u) > -\infty,$$

Entonces se alcanza el ínfimo en m . Más precisamente, existe $z \in M$ tal que $J(z) = m$ y $\nabla_M J(z) = 0$.

Para fijar ideas y aplicar el teorema anterior, mostramos el siguiente ejemplo en el que se prueba la existencia de una solución positiva de un problema de tipo Dirichlet.

Ejemplo 2.3. [2] Consideremos el siguiente problema de valor inicial:

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = f(u(x)), & x \in \Omega; \\ u(x) = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.5)$$

Ω es un dominio acotado \mathbb{R}^n y $f \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ satisface las siguientes suposiciones: Existen $a_1, a_2 > 0$ y $p \in (1, (n+2)/(n-2))$ tal que:

$$|f(u)| \leq a_1 + a_2|u|^p,$$

$$|uf'(u)| \leq a_1 + a_2|u|^p, \quad |u^2 f''(u)| \leq a_1 + a_2|u|^p.$$

Si $f(u) = uh(u)$ donde

(h1) h es convexo,

$$(h2) \quad uh'(u) > 0, \quad \forall u \neq 0,$$

$$(h3) \quad h(0) = 0,$$

$$(h4) \quad \lim_{u \rightarrow \infty} h(u) = \infty$$

Por ejemplo, si $h(u) = |u|^{p-1}$, $1 < p < \frac{n+2}{n-2}$ satisface las condiciones (h1) – (h4)

2.3.3. Categoría de Lusternik - Schnirelmann

El principal paradigma de las matemáticas y de la ciencia ha sido descomponer un problema en pequeñas piezas, entenderlas, resolverlas y luego volverlas a ensamblar y así resolver el problema original. Al surgir la topología diferencial, se trató de resolver este paradigma utilizando el cálculo variacional como herramienta.

En los primeros años de desarrollo de esta ciencia, Poincaré ya reconocía que la existencia y forma de las soluciones de una ecuación diferencial están conectadas íntimamente a la topología del espacio donde dichas ecuaciones son encontradas. Este “lugar” en donde ocurre todo este fenómeno se lo llamó variedad.

En este contexto, hemos considerado parafrasear la introducción de [10] en que se menciona que el primer paso para desarrollar el cálculo variacional fue estimar el número de puntos invariantes para un caso particular de un gradiente o equivalentemente estimar en número mínimo de puntos críticos de las funciones dentro de una variedad. Paralelamente, Lusternik y Schnirelmann describen un nuevo invariante de una variedad llamada *categoría*. Su objetivo era crear esta noción para proveer un límite inferior para el número de puntos críticos para cualquier función suave dentro de una variedad. En general, la Categoría de Lusternik - Schnirelmann tiene como aplicación obtener resultados de la existencia de soluciones de una geodésica cerrada y es considerada una teoría elegante que ayuda encontrar puntos críticos de un funcional J sobre una variedad M , de tal manera que se conecta con las propiedades topológicas de M .

Como es de esperarse, la categoría de Lusternik - Schnirelmann es como una pintura de Picasso: visto de diferente perspectiva produce impresiones diferentes en belleza y aplicabilidad.

En general, esta teoría sirve para encontrar multiplicidad de soluciones.

Observación 2.1. En adelante, y hasta el final de este apartado, tomaremos la siguiente notación:

$$M = G^{-1}(0), \quad \text{donde } G \in C^{1,1}(E, \mathbb{R}) \quad \text{y} \quad G'(u) \neq 0, \forall u \in M. \quad (2.6)$$

Sea M un espacio topológico y A un subconjunto de M . Se dice que A es contractil en M si la inclusión $i : A \rightarrow M$ es homotópica a una constante $p \in M$, es decir, existe $H \in C([0, 1] \times A, M)$ tal que $H(0, u) = u$ y $H(1, u) = p$.

Definición 2.1. [10] La Categoría Lusternik-Schnirelmann de A respecto a M denotada por $cat(A, M)$, es el menor entero k tal que $A \subset A_1 \cup \dots \cup A_k$, con $A_i (i = 1, 2, \dots, k)$

cerrado y contráctil en M .

Si la $cat(\emptyset, M) = 0$ y $cat(A, M) = +\infty$, entonces no existen enteros con la propiedad anterior.

Notaremos a $cat(M)$ para $cat(M, M)$.

Observación 2.2. De la definición anterior se tiene que $cat(A, M) = cat(\bar{A}, M)$. Más aún, se tiene que $cat(A, M) \geq cat(A, Y)$ si $A \subset M \subset Y$.

A continuación introduciremos un teorema y una definición muy importantes para nuestros fines, diferentes a los conceptos expuestos en el Apéndice B.

Teorema 2.10. Teorema de Lusternik - Schnirelmann: Sea M un variedad de Banach paracompacta de tipo C^2 . Supongamos que $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ es una función de tipo C^2 y cumple con la Condición C. Luego, el número de puntos críticos de f es mayor o igual que $cat(M) + 1$.

Notemos como $Crit(M)$ como el número mínimo de puntos críticos de cualquier función suave sobre M . Entonces podemos escribir:

$$cat(M) + 1 \leq Crit(M)$$

Definición 2.2. Condición (C). Dado $S \subset M$ para los cuales f es acotada, pero para $\|df\|$ no está acotada fuera de cero sobre S , entonces existe un punto crítico de f sobre \bar{S} .

Género de Krasnoselski: [2] El género de Krasnoselski es una herramienta esencial, junto con el Teorema 2.10, al momento de buscar puntos críticos; los mismos que asociados a la categoría de Lusternik - Schnirelmann dan resultados muy interesantes.

Para esto, el conjunto \mathcal{A} se definirá como sigue:

$$\mathcal{A} = \{A \in E \setminus \{0\} : A \text{ es simétrico; i.e., si } u \in A \Rightarrow u^{-1} \in A\}.$$

Si tomamos como $A \in \mathcal{A}$, el género $\gamma(A)$ de A se define como el entero más pequeño n tal que existe $\phi \in C(E, \mathbb{R}^n)$ tal que ϕ es impar y $\phi(x) \neq 0$ para todo $x \in A$. Se dice que $\gamma(A) = +\infty$ si no hay números enteros con las propiedad anterior; y $\gamma(\emptyset) = 0$.

Como resultado de todo lo anterior, exponemos el siguiente teorema que es de vital importancia en los capítulos posteriores para demostrar la multiplicidad de soluciones de la Ecuación no-lineal de Schrödinger con frecuencia crítica.

Dado un espacio de Banach E , escribimos $\Sigma_E = \{A \subset E : A = \bar{A}, A = -A, 0 \notin A\}$; siendo Σ_E de género γ Kranoselskii [33], [2].

Teorema 2.11. Sea $M \in \Sigma_E$ de clase C^1 una sub variedad de E y sea $f \in C^1(E)$. Suponga que (M, f) satisface la condición de Palis-Smale [2] y

$$C_k(f) = \inf_{A \in \mathcal{A}_k(M)} \max_{u \in A} f(u), \quad (2.7)$$

donde

$$A_k(M) = \{A \in \Sigma_E \cap M : \gamma(A) \geq k\}. \quad (2.8)$$

Si $C_k(f) \in \mathbb{R}$ entonces $C_k(f)$ es un valor crítico para f . Además, si $c \equiv C_k(f) = \dots = C_{k+m}(f)$ entonces $\gamma(K_c) \geq m + 1$. En particular, si $m > 1$ entonces K_c , el conjunto de los puntos críticos correspondiente al valor c , contiene infinito número de elementos.

2.4. Métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales

En esta sección trataremos las ideas principales del Método de Runge-Kutta de cuarto orden (**RK4**) para la resolución de Ecuaciones Diferenciales lineales y no lineales; además de una breve explicación de las características del software SciLab en que se implementó el código para encontrar algunas soluciones de la Ecuación no lineal de Schrödinger con frecuencia crítica.

2.4.1. Introducción

Uno de los problemas más importantes en matemáticas aplicadas es la solución de Ecuaciones Diferenciales. En general, el objetivo para la resolución de estas ecuaciones diferenciales es buscar una función diferenciable $y = y(x)$, cuya derivada $y'(x)$ satisface la ecuación de la forma $y'(x) = f(x, y(x))$. Las soluciones para este problema son en general infinitas; sin embargo si tenemos como requisitos extra *condiciones iniciales*, entonces se pueden encontrar ciertas soluciones únicas.

En consecuencia, se puede describir el problema anterior como un problema de valor inicial de la siguiente manera:

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y), \\ y(x_0) = y_0. \end{cases} \quad (2.9)$$

Para que la ecuación (2.9) exista solución y sea única, es necesario lo siguiente:

Definición 2.3. Un punto fijo de una función $f : M \rightarrow M$ es un punto $x \in M$ tal que $f(x) = x$.

Definición 2.4. Sean M, N espacios métricos. Una aplicación $f : M \rightarrow M$ es una contracción cuando existe una constante α , con $0 \leq \alpha < 1$ tal que:

$$d(f(x), f(y)) \leq \alpha \cdot d(x, y), \quad \forall x, y \in M. \quad (2.10)$$

Teorema 2.12. (*Punto fijo de Banach*). Si M es un espacio métrico completo, toda contracción $f : M \rightarrow M$ posee un único punto fijo en M .

La demostración del Teorema 2.12 se puede encontrar en [23] y de corolarios importantes del mismo teorema en [38].

Finalmente, mostramos los teoremas de existencia y unicidad de soluciones de una ecuación diferencial.

Teorema 2.13. [24]**Teorema de existencia:** Si $f(x,y)$ es continua en todos los puntos (x,y) en algún rectángulo R :

$$|x - x_0| < a, \quad |y - y_0| < b,$$

y está acotada en R ; es decir:

$$f(x,y) \leq K; \quad \text{para cada } (x,y) \in \mathbb{R},$$

entonces el problema de valor inicial (2.9) tiene al menos una solución $y(x)$. Esta solución está definida al menos para todo x en el intervalo $|x - x_0| < \alpha$; donde α es el menor entre a y $\frac{b}{K}$.

Teorema 2.14. [24]**Teorema de la unicidad:** Si $f(x,y)$ y $\frac{\partial f}{\partial y}$ son continuas para todos los puntos (x,y) en algún rectángulo R y están acotadas, es decir:

$$|f| \leq K, \quad \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < M; \quad \text{para toda } (x,y) \in R,$$

entonces el problema de valor inicial (2.9) tiene al menos una solución $y(x)$. Por lo tanto, por el Teorema 2.13 tenemos exactamente una solución. Esta solución está definida al menos para todo x en el intervalo $|x - x_0| < \alpha$.

Puede obtenerse la sucesión $(y_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tal que:

$$y_n(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f[t, y_{n-1}(t)] dt; \quad n \in \mathbb{N}$$

converge a la solución $y(x)$.

2.4.2. Métodos de Runge-Kutta para la solución de Ecuaciones diferenciales

Los códigos usuales para la resolución numérica de problemas de valor inicial presuponen que inicialmente se procederá en el modo paso a paso, es decir, suponiendo que conocemos una aproximación y_n a la solución en el punto x_n , el método numérico nos proporciona una nueva aproximación y_{n+1} en el punto x_{n+1} . De aquí que los métodos numéricos para resolución de ED se clasifiquen en métodos de un paso y métodos multipaso.

Si bien el objetivo de este documento no es discutir la convergencia, estabilidad y consistencia de estos métodos numéricos, si diremos que los métodos Runge-Kutta (**RK**) son mundialmente conocidos no solo por su sencillez en el planteamiento, sino que también por su habitual convergencia a la solución esperada. Parra una mayor discusión y análisis de los métodos a un paso y multipaso, se recomienda [32].

Un método se dice que es **(RK)** si este se puede escribir de la siguiente forma:

$$\begin{cases} k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), & i = 1, 2, \dots, s; \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i. \end{cases} \quad (2.11)$$

Así podemos constatar que el método de Euler es un **(RK)** de orden 1, el método de Heun y el del punto medio son métodos de **(RK)** de orden 2 según [29], [36] y [40].

Otras fórmulas de mayor orden fueron propuestas también por Runge en 1895 y por Heun y Kutta en trabajos posteriores. En particular está el método bien conocido **RungeKutta** de cuarto orden **(RK4)** descrito como sigue:

$$\begin{cases} K_1 = f(x_i, y_i) \\ K_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hK_1}{2}\right) \\ K_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hK_2}{2}\right) \\ K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \end{cases} \quad (2.12)$$

De esta fórmula Runge dijo en 1905 “Los nuevos métodos que el señor Kutta ha desarrollado son los mejores” lo cual toma sentido ya que los métodos de Runge-Kutta son y han sido ampliamente usados por su simplicidad, facilidad de programación y resultados numéricos satisfactorios.

Observación 2.3. La convergencia de los métodos **(RK)** consiste en realizar una aproximación lo suficientemente cercana a la solución para que el método converja más rápidamente; siempre y cuando se traten de problemas lineales.

Cuando se tiene problemas no lineales, como en nuestro caso, utilizamos estos métodos **(RK)** variando y corrigiendo iterativamente los valores iniciales de las aproximaciones sin perder de vista la convergencia del mismo. Sin embargo, este criterio es insuficiente y no general al momento de considerar problemas con múltiples soluciones; por lo que es importante “controlar”, de alguna manera, que las soluciones encontradas sean las mismas. En consecuencia, es natural pensar en que se debe utilizar un “método híbrido” que por un lado se controle la convergencia y por el otro se controle que las soluciones sean las mismas. Esta fue una de las razones para utilizar el método del disparo que se menciona en el siguiente apartado.

2.4.3. Método del disparo para problemas con condiciones de frontera

Considere el siguiente problema de contorno no-lineal de segundo orden:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') & \text{para } a \leq x \leq b, \\ y(a) = \alpha, \\ y(b) = \beta. \end{cases} \quad (2.13)$$

En este caso, la solución no puede expresarse como una combinación lineal de las soluciones de los problemas de dos valores iniciales; sino como una sucesión de problemas de valor inicial en función de un parámetro t . En este sentido, transformamos el problema (2.13) en el siguiente problema:

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') & \text{para } a \leq x \leq b, \\ y(a) = \alpha, \\ y'(a) = \gamma_k. \end{cases} \quad (2.14)$$

Si tomamos como $y(x, \gamma_k)$ una solución del problema inicial (2.14), entonces necesitamos encontrar una sucesión $\{\gamma_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ tal que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y(x, \gamma_k) = y(x)$$

Realizando esta transformación, lo que buscamos es:

$$\phi(\gamma) = y(b, \gamma) - \beta = 0$$

o en términos numéricos

$$|y(b, \gamma) - \beta| < \varepsilon \quad \text{cuando } \varepsilon \rightarrow 0$$

Dado que el problema que tratamos es un problema no lineal y no continuo en todo punto, el método de la secante es el más apropiado.

Si generamos γ_0 y γ_1 , en términos numéricos tenemos:

$$\gamma_k = \gamma_{k-1} - \frac{(y(b, \gamma_{k-1}) - \beta)(\gamma_{k-1} - \gamma_{k-2})}{y(b, \gamma_{k-1}) - y(b, \gamma_{k-2})} \quad \text{para } k = 2, 3, \dots \quad (2.15)$$

2.4.4. SCILAB

Usamos **SciLab** para realizar experimentos matemáticos, puesto que es apropiado resolver ED mediante rutinas programadas; que además tiene un lenguaje de programación de alto nivel. Los programas realizados en SciLab suelen ser pequeños, lo cual ayuda al usuario a manipular de manera más dinámica el software y hacer uso de su versatilidad.

El software científico SciLab, fue desarrollado por el *INRIA* (Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique) y el *ENPC* (Ecole Nationale des Ponts et Chaussées) de Francia, es similar a MATLAB, pero con la ventaja que puede ser distribuido libremente y ser utilizado en varios sistemas operativos como UNIX, Windows y Linux.

Además **SciLab** ofrece al usuario las siguientes características:

- i) Disponibilidad de la última versión vía Internet;
- ii) El programa puede ser utilizado, copiado y distribuido en forma legal;
- iii) Los resultados obtenidos pueden ser divulgados sin restricción;
- iv) Se tiene acceso al código fuente;
- v) La certeza de estar participando de una comunidad cuyo principal objetivo es la difusión irrestricta del conocimiento.
- vi) En mayo del 2003 se crea “SciLab Consortiu”, un consorcio de empresas colaboradoras como Renault, Peugeot-Citroën, Commissariat à l’Energie Atomique, Centre National d’Etudes spatiales, Dassault Aviation, Electricité de France; y empiezan a utilizar Scilab en la industria para modelamiento matemático y simulaciones en ingeniería.

En la página web *http://www.Scilab.org* se encuentran varios manuales para mejor manipulación y su descarga. Para obtener una información más detallada se recomienda [7] y [29].

Capítulo 3

UNA INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA

Este apartado resume las ideas principales de la Mecánica Cuántica que son necesarias y básicas para nuestro estudio; llegando hasta las postulaciones de la Ecuación de Schrödinger y su construcción. Además, se hace una pequeña introducción a la historia de cómo se gestó esta teoría y los experimentos científicos que determinaron las limitaciones de la Mecánica Clásica.

3.1. Definiciones de la Mecánica Cuántica

La Mecánica Cuántica es una Teoría Física peculiar dado que para su formulación se necesita de un caso límite de la Mecánica Clásica y al mismo tiempo se requiere de este caso límite para su formulación. Esta ciencia comenzó su desarrollo en el año 1859 determinado por grandes descubrimientos como la *Radiación del cuerpo negro* que fue esencialmente trabajado por **Max Plank**, *El Efecto Fotoeléctrico* estudiado por **Albert Einstein** y la *Dualidad de Onda-Corpúsculo* propuesta por **Louis de Broglie**. La historia de estos experimentos, así como una pequeña biografía de los autores se puede encontrar en [26] y [18].

Esta teoría nace como respuesta a las contradicciones que provocaba la Mecánica Clásica para describir los fenómenos que sucedían en niveles cada vez más pequeños (llegando al corazón de la materia como son los átomos, electrones, etc) comparándola de forma analítica con los resultados experimentales. Es por esta razón que fue necesario crear una nueva teoría que pueda explicar satisfactoriamente los fenómenos atómicos y sus comportamientos.

Experimentos como el de la *doble rendija de Young* (descrito ampliamente en [15]) determinaron que los llamados electrones no solamente se comportan como partículas sino como también ondas. Esta dualidad se descubrió mediante aparatos que se pusieron para medir y observar este fenómeno.

Para fijar las ideas, llamaremos aparato a un objeto clásico que interactúe con una partícula cuántica, que por simplicidad asumiremos que es un electrón, a lo cual llamaremos medida. Una cantidad física es la característica cuantitativa de un estado y está determinada por una medida. Si en algún estado, como consecuencia de una medida se obtiene un resultado único, decimos que en este estado la cantidad física tiene un valor definido.

Con estas ideas definidas, se construyó la teoría de la Mecánica Cuántica con el principio de correspondencia, de tal manera que la Mecánica Clásica fuera un caso límite de la Mecánica Cuántica. Una analogía útil propuesta en [28, pág 20] para comprender esta construcción es la siguiente: *“La Mecánica Cuántica es a la Mecánica Clásica lo que la Óptica Ondulatoria es a la Óptica Geométrica. En Óptica Ondulatoria, las ondas electromagnéticas son descritas por los campos eléctrico y*

magnético; por otro lado, en Óptica Geométrica se considera que la propagación de la luz se da a lo largo de caminos definidos. Por lo tanto (para empezar) la Mecánica Clásica le corresponde, en Mecánica Cuántica, funciones de onda de la forma $\Psi = v \exp(i\phi)$ donde v es una función que varía muy poco en el tiempo y ϕ es muy grande”.

A pesar que la Mecánica Cuántica empezó su desarrollo muchos años atrás, el descubrimiento del electrón y el neutrón fueron en 1897 y 1932 respectivamente. En las siguientes secciones se explorará un poco más algunos tópicos de la Mecánica Cuántica.

3.1.1. Experimento de la Doble Rendija

Nos hemos basado en [15] y [31] para describir este experimento.

La Figura 3.1 muestra el esquema que se utilizaría para constatar el comportamiento cuántico del electrón; para lo cual hemos dividido en tres experimentos comparativos.

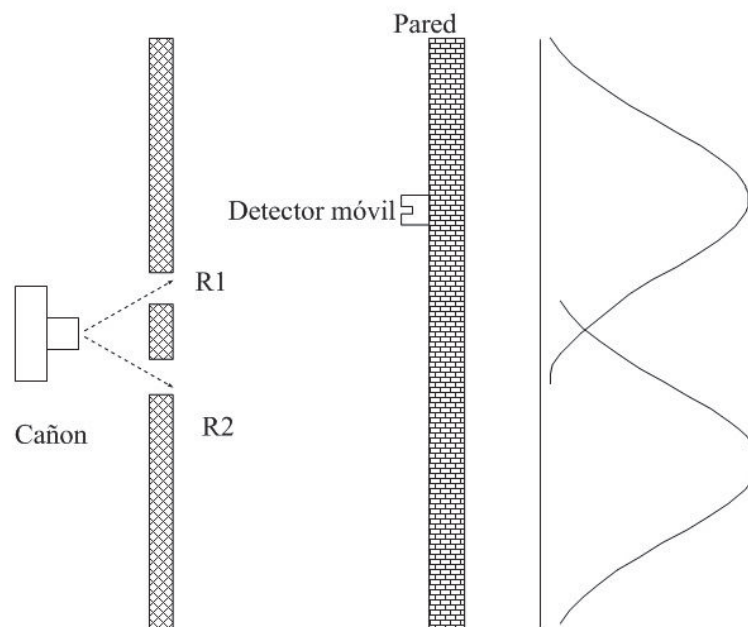


FIGURA 3.1. Esquema para constatar el experimento de la doble rendija. Fuente [31]

- Experimento clásico (Proyectiles):** para este primer experimento tendremos un cañón que dispara proyectiles. Entre el cañón y la pared que detecta los proyectiles disparados hay otra pared con dos rendijas intermedias R1 y R2, que podemos tener abiertas o cerradas, independientes entre sí. En la pared final disponemos de un detector, algo que permite controlar cuántos proyectiles y donde exactamente golpean la pared en función de posición en la pared, a la que llamaremos la coordenada x .

Para el caso en el que los cuerpos sean macroscópicos (objetos que no puedan partirse), observaremos que los proyectiles llegan al detector individualmente, y pasan por una y solo una de las rendijas intermedias. Si hacemos el experimento con $R1$ abierta y $R2$ cerrada, encontraremos un diagrama de probabilidad como el que se recoge en la Figura 3.2. Si lo hacemos al revés, con $R1$ cerrada y $R2$ abierta, el diagrama es equivalente pero desplazado. Si hacemos el experimento con ambas rendijas abiertas, el diagrama que obtendremos se parece mucho a los anteriores pero ahora está centrado y, en realidad, es la suma de ambos resultados; es decir: $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$.

En consecuencia, diremos que este experimento no hay interferencia.

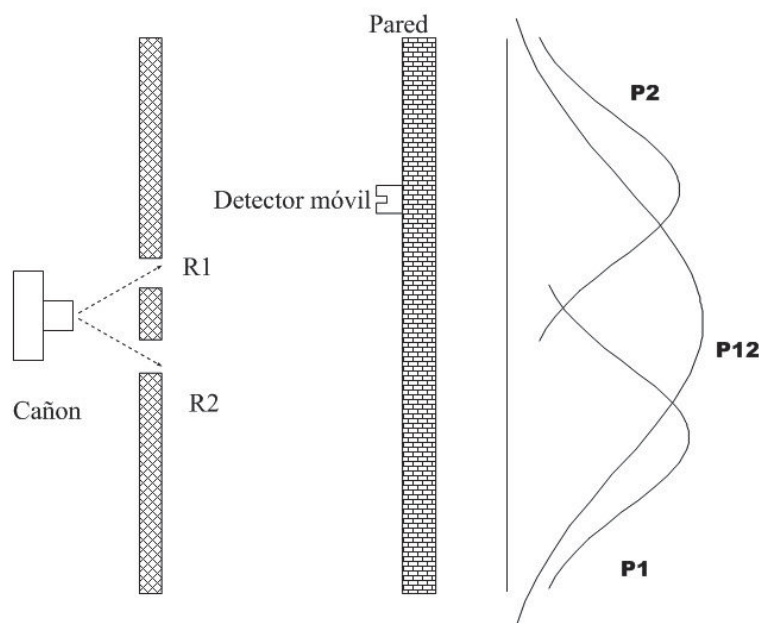


FIGURA 3.2. Experimento con proyectiles macroscópicos. Fuente [31]

- Experimento con Ondas:** replicaremos el experimento anterior pero ahora con ondas; que para fines prácticos y de visualización utilizaremos agua. En este caso reemplazamos el cañón por una fuente puntual de ondas que se propaguen por igual en todas las direcciones. Además, el detector que necesitaremos sería un detector de intensidad o algo que nos permita medir la intensidad de la onda al llegar a la pared. Luego, realizamos e nuevo el experimento con una y después otra rendija abierta; pero cuando hacemos el experimento con ambas rendijas abiertas, el resultado que obtenemos no es la suma de los dos resultados anteriores. Por lo tanto, concluimos que existe interferencia entre ambas ondas. ¿Por qué ocurre esto?

En algunos lugares, donde P_{12} tiene sus máximos, las ondas provenientes de una y otra rendija están en fase, y las ondas se suman para dar una gran amplitud. Por el contrario, hay algunos lugares donde la amplitud de P_{12} es mínima, en los que las ondas están desfasadas con una diferencia justamente de π . La intensidad es proporcional al cuadrado de la amplitud de la onda,

cuyo detalle lo podemos constatar en el Gráfico 3.3:

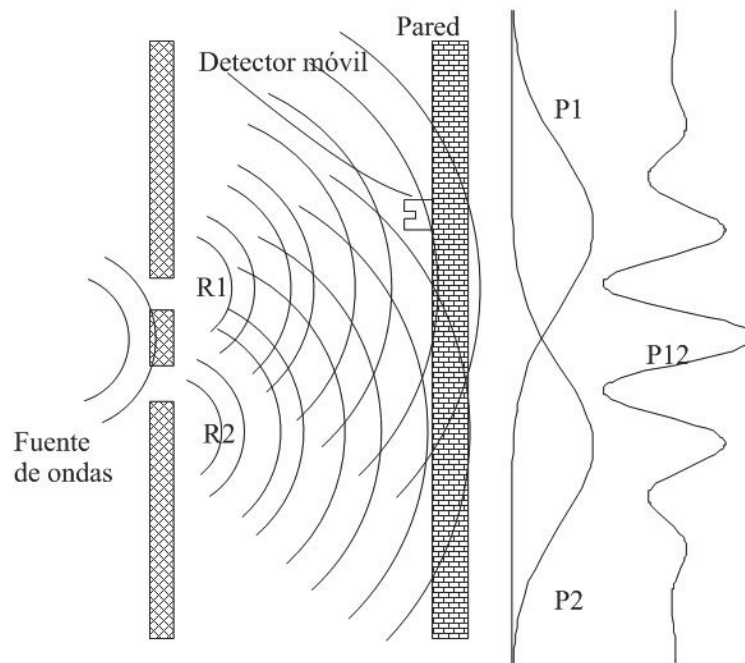


FIGURA 3.3. Experimento con Ondas. Fuente [31]

- Experimentos con electrones:** para realizar el último experimento necesitaremos imaginar y abstraer algunas situaciones. Imaginemos que construimos un cañón de electrones, de modo que conseguimos (imaginariamente) que podamos disparar los electrones de uno en uno.

Si alguna de las rendijas está abierta, los electrones llegarán a la pantalla y la golpearán por separado; pero siempre golpeando en un solo sitio. En principio, los electrones no son como una onda, o eso parecería. Sin embargo, si se abren las dos rendijas, entonces no obtendremos una gráfica para la probabilidad que sea la suma de ambos resultados por separado, sino una gráfica en la que se observa una interferencia.

Este fenómeno se encuentra descrito en la Figura 3.4. Con base en nuestro experimento anterior, no se espera que cada electrón pase por una y sólo una de las rendijas $R1$ o $R2$ sino que a lo mejor los electrones pueden viajar de formas más complejas. Por ejemplo, podríamos pensar que el electrón se divide; aunque esto es imposible porque hemos visto que llegan de uno en uno a la pantalla. Se podrían intentar explicar sin éxito la curva de probabilidad para el golpeo del electrón.

A pesar de todo esto, la matemática necesaria para explicar este fenómeno es muy simple ya que es la misma que se aplica a los anteriores gráficos, cuyas figuras eran simples ya que describen ondas.

Por lo tanto, concluimos que los electrones llegan a la pantalla como partículas, pero la probabilidad de llegar a un punto u otro de la pantalla se distribuye

como si fuera una onda. Por esto decimos que los electrones a veces se comportan como una onda y otras veces como partículas, y esto es llamado por todos y con razón, la dualidad onda-partícula.

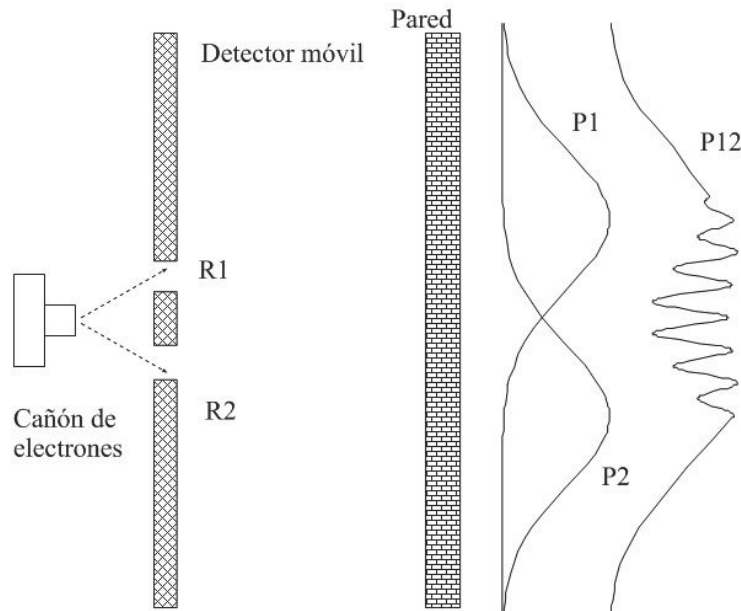


FIGURA 3.4. Experimento con Electrones. Fuente [31]

3.1.2. El Efecto Fotoeléctrico

El Efecto Fotoeléctrico fue descubierto en 1887 por Hertz al observar que una descarga eléctrica entre dos electrodos se produce más fácilmente si sobre uno de ellos incide luz ultravioleta. Años más tarde, en 1905, Einstein en su ensayo *Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen* (Un punto de vista heurístico sobre la producción y transformación de luz) comprobó que los electrones aumentaban proporcionalmente a la intensidad de la radiación pero “incomprensiblemente” la velocidad de estos no dependía de la intensidad sino de la frecuencia: a mayor frecuencia, mayor velocidad. Para una comprensión más amplia del experimento y su teoría cuántica, se puede consultar en [19, pág 1-2] y [18, pág 23-27]. Para resolver este problema, Einstein supuso que se usa una luz monocromática compuesta por “cuantos de energía luminosa” $\hbar\omega$. Según el experimento del efecto fotoeléctrico, se bombardea la lámina metálica con partículas luminosas cada una de las cuales tiene estos “cuantos de energía” $\hbar\omega$. Denotemos a W como la energía necesaria para extraer el electrón del metal; por lo tanto la energía cinética de los electrones E_c viene denotada por:

$$E_c = \hbar\omega - W,$$

donde \hbar es la constante de Planck. Años más tarde se comprobó que a pesar que se pensaba unánimemente que la luz era una emisión continua, al parecer tenía cierta naturaleza corpuscular.

3.1.3. La Dualidad Onda-partícula

Experimentos sobre la naturaleza de la luz muestran que, dependiendo del tipo de experimento, la luz puede ser descrita como ondas o partículas. La propiedad de ondas aparece en el contexto de la difracción y el fenómeno de interferencia, mientras que el concepto de partícula se muestra en los experimentos del efecto fotoeléctrico. El francés Louis de Broglie influenciado por el fenómeno corpuscular y por los descubrimientos de Einstein, sobre el efecto fotoeléctrico, en 1923 postula que la dualidad onda-partícula que Einstein había proclamado para luz y que también debía ser cierta para las partículas materiales, e.g. el electrón. Esto quiere decir que si Einstein había descubierto la propiedad corpuscular para la luz, de Broglie la postuló para la materia. Para esto, de Broglie pensó en idear una ley válida para los protones, ya que suele ser cierta para cualquier tipo de materia; y por lo tanto equiparó un electrón a una onda plana, de manera que si tenemos un electrón de masa m y velocidad v , su momento p está determinado por la siguiente relación:

$$p = mv = \frac{E}{v} = \frac{\hbar\omega}{v} = \frac{2\pi\hbar}{vT} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Y con esta postulación finalmente se dio sentido a las famosas órbitas de Borh: estas eran justo aquellas órbitas cuyo cociente entre su longitud y la longitud de onda del electrón era un número entero. Para profundizar en este experimento y sus consecuencias físicas se recomienda [27, pág 22] y [19, pág 29-34].

3.2. El Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Cuando tratamos de aplicar las matemáticas de la Mecánica Clásica y la Electrodinámica a fenómenos atómicos, los resultados difieren de los datos tomados en los experimentos. Esto se puede ver fácilmente cuando se aplica la electrodinámica para describir el movimiento de los electrones al rededor del núcleo por trayectorias clásicas. Más aún, en la Mecánica Clásica se tiene el concepto de camino de una partícula y por lo tanto se puede predecir con exactitud dónde estará una partícula a un tiempo t_0 , mientras que en la Mecánica Cuántica se reemplaza esta exactitud por una función probabilística, dado que el concepto de trayectoria en esta teoría no es aplicable. Este es fundamento del Principio de Incertidumbre propuesto por Heisenberg en 1927.

Formalmente, el Principio de Incertidumbre de Heisenberg establece que existe la imposibilidad de que determinados pares de magnitudes físicas sean conocidas con precisión arbitraria. Este principio es de vital importancia en la Mecánica Cuántica dado que denota la probabilidad asociada a ser relacionadas estas magnitudes físicas al ser medidas. Este principio no se basó en las hipótesis de Broglie, sino que Heisenberg se basó en las propiedades corpusculares de la radiación electromagnética y sus consecuencias sobre el proceso de medición ya que *“la medición de una de las dos cantidades inevitablemente perturba a la partícula de modo tal que deja incierto el valor de la otra cantidad”*. El estudio de este principio es fundamental en la Mecánica Cuántica, cuya importancia se ilustra en [25, pág 1-5], [18, pág 58-65], [19, pág 51-53] y [27, pág 27-30,42-43].

3.3. Principio de Superposición

Uno de los principales fundamentos de la Mecánica Cuántica es el Principio de Superposición lineal de los estados o simplemente el Principio de Superposición. Es importante mencionar que el formalismo matemático también se convirtió en una ciencia que influenció ampliamente a la Mecánica Cuántica, comparada con la Mecánica Clásica.

Denotaremos a q como el conjunto de coordenadas de un sistema cuántico; y dq al producto diferencial de estas coordenadas. Sea Ψ la función de onda asociada del sistema; y por lo tanto $\Psi(q)$ es la función que describe el estado de un sistema de coordenadas. Además, $|\Psi|^2 dq$ es la probabilidad relativa según la cual dicha q tomará determinado valor. Por lo tanto, el estado de un sistema puede ser descrito mediante la función de onda Ψ , de tal manera que la probabilidad de que el sistema se encuentre en una región $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ está denotada por:

$$\int_{\Omega} |\Psi|^2 dq.$$

Por otro lado, tenemos que:

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\Psi|^2 dq = 1. \quad (3.1)$$

Si Ψ_1 y Ψ_2 describen la evolución de los estados, entonces $\alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2$, donde α_1 y α_2 son constantes, también describe la evolución de un estado. A esto se lo conoce como el **Principio de Superposición de Estados**. El conjunto de todos los estados posibles de una partícula a un tiempo será, usualmente $L^2(\mathbb{R}^d)$.

De la misma manera, consideremos ahora un sistema compuesto por dos partes; y suponga que el estado de este sistema está dado tal que cada parte se encuentra completamente descrita, lo que significa que todo el sistema está completamente descrito. Por lo tanto, si tenemos q_1 y q_2 conjuntos de coordenadas se cada sistema cuántico, la función de onda $\Psi_{12}(q_1, q_2)$ del sistema puede ser representada como el producto de de las funciones de onda $\Psi_1(q_1)$ y $\Psi_2(q_2)$ de cada parte; es decir:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1)\Psi_2(q_2).$$

Si la interacción entre las partes es nula, entonces la función de onda del sistema en el tiempo se escribe:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2, t) = \Psi_1(q_1, t)\Psi_2(q_2, t).$$

El Principio de Superposición se estudia más ampliamente en [19, pág 48-50] y [25, pág 6-8].

3.4. Sistemas Semiclásicos

Al principio introducimos una analogía muy útil que ayudó a que la Mecánica Cuántica pueda ser definida a partir de la Mecánica Clásica, como un caso límite de esta última. En la teoría de ondas ópticas, las ondas electromagnéticas se describen por campos de vectores eléctricos y magnéticos, que son gobernados por las ecuaciones de Maxwell. Por otro lado, la óptica geométrica postula que la propagación de la luz se produce a través de caminos definidos, también conocidos como rayos.

Sea u cualquiera de las componentes del campo de la onda electromagnética. u puede ser escrita en función de la amplitud a y la fase de onda ϕ como sigue:

$$u = a \exp(i\phi), \quad a, \phi \in \mathbb{R}.$$

En base a estas consideraciones, decimos que la Óptica Geométrica es un caso límite de la Teoría de Ondas Ópticas, cuando ϕ toma valores grandes para distancias cortas.

De la misma manera, en la Mecánica Clásica suponemos que existen en Mecánica Cuántica las funciones de onda Ψ que son de la forma:

$$\Psi = a \exp(i\phi),$$

donde a es una función de las coordenadas de la posición que varía muy poco, y ϕ toma valores muy grandes.

Además, según el principio de mínima acción de la Mecánica Clásica que estipula que dada una acción S de un sistema, esta tomará el menor valor posible. Por otro lado, la óptica geométrica contempla que el camino del rayo se determina por el principio de Fermat; que no es más que la diferencia entre la fase inicial y final; la misma que tomará su menor (o mayor) valor posible. Dados estos hechos podemos decir que, en el caso límite, la fase de una función de onda es proporcional a la acción mecánica S del sistema físico considerado, cuya constante de proporcionalidad viene dada por la constante de Planck: $\hbar = 1,054 \times 10^{-34} J \cdot s$.

Así, la función del sistema semiclásico es:

$$\Psi = a \exp\left(\frac{Si}{\hbar}\right).$$

La constante de Planck tiene un papel muy importante en los fenómenos cuánticos, ya que determina el grado de cuantización de un sistema físico dado. Por lo tanto, si para un sistema físico, una variable dinámica natural (e.g. una coordenada de posición, una componente del momento, etc.) que tiene las dimensiones de una acción toma un valor numérico comparable con la constante de Planck; y el comportamiento de este sistema se puede describir por la Mecánica Cuántica. Por otro lado, toda variable cuya dimensión sea la de una acción, esta es muy grande respecto a \hbar como unidad y las leyes de la Mecánica Clásica son válidas.

Finalmente, la Mecánica Cuántica tiende a la Mecánica Clásica como un paso al límite cuando $\hbar \rightarrow 0$.

3.5. La Ecuación de Schrödinger

En 1926, Erwin Schrödinger formalizó la Mecánica Cuántica derivando una ecuación que describe satisfactoriamente los fenómenos físicos microscópicos. Una de las formas clásicas para “derivar” la Ecuación de Schrödinger se encuentra en [19, pág 117-119], que esencialmente supone que se tiene una función de onda $\Psi(x,t)$ asociada a un sistema clásico, cuya energía viene dada por la función de Hamilton, el Hamiltoniano $H(x,\rho)$; con x siendo la coordenada y ρ el impulso.

Por lo tanto, Schrödinger postuló que para una onda $\Psi(x,t)$ en el caso estacionario, cuando no hay dependencia del tiempo se tiene:

$$H(x,\hat{\rho})\Psi(x,t) = E\Psi(x,t), \quad \hat{\rho} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.2)$$

En la ecuación (3.2) tenemos que E es la energía del sistema asociado a la función de onda Ψ .

Para el caso cuando tenemos un Hamiltoniano estándar:

$$H(x,t) = \frac{\rho^2}{2m} + V(x),$$

con $V(x)$ siendo la energía potencial. Si reemplazamos este hamiltoniano en la (3.2) obtenemos:

$$\begin{aligned} E\Psi(x,t) &= H(x,\hat{\rho})\Psi(x,t), \\ E\Psi(x,t) &= \left[\frac{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2}{2m} + V(x) \right] \Psi(x,t), \\ E\Psi(x,t) &= \left[\frac{i^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}}{2m} + V(x) \right] \Psi(x,t), \end{aligned} \quad (3.3)$$

entonces,

$$E\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t). \quad (3.4)$$

La ecuación (3.4) es la Ecuación de Schrödinger.

Para las siguientes secciones se han tomado en cuenta los textos [25], [19] y [27].

3.6. Postulados de la Mecánica Cuántica

Hemos decidido dar un enfoque matemático a los postulados de la Mecánica Cuántica, para lo cual nos hemos basado en [27] para describir este apartado.

Los principios de la Mecánica Clásica deben obtenerse de los axiomas de la Mecánica Cuántica al pasar al mundo macroscópico donde la física clásica es aplicable; es por esta razón que se necesitan varias leyes matemáticas que determinen la correcta axiomática de la Mecánica Cuántica, e.g. tenemos los siguientes fundamentos:

- i) La función de onda $\Psi(x,t)$ es inherente compleja y por lo tanto no se puede medir con un instrumento real. Esta característica es deseable pues impide que la función de onda se le atribuya una existencia física como las de las olas de la superficie del agua. Además, la función de onda no aparece en la teoría de Heisenberg y sin embargo los resultados en la Mecánica Cuántica son equivalentes; y es por esta razón que la función de onda contiene toda la información sobre la partícula asociada.
- ii) Cualquier magnitud física se describe a través de un operador lineal hermitiano \hat{A} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H}^1 , cuyos vectores Ψ determinan los posibles estados del sistema físico.
- iii) Los valores $f(a')$ que puede tomar la magnitud física son aquellos que corresponden al espacio del operador lineal hermítico \hat{A} que caracteriza dicha magnitud.
- iv) El valor esperado de una magnitud física x cualquiera de un sistema en el estado Ψ es $\langle \Psi, x\Psi \rangle$, donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es el producto escalar en el espacio de Hilbert.
- v) La función de onda Ψ del sistema se determina en base a la Ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, donde \hat{H} es el operador de Hamilton del sistema.

Con estas ideas claras, procedemos a mencionar los postulados de la Mecánica Cuántica.

Postulado 3.1. El estado de una partícula de masa m en el instante de tiempo t viene biunívocamente determinado por una función de onda $\Psi(q,t)$. La densidad de probabilidad que permite de encontrar la partícula en el instante t en la región del espacio de volumen d^3q al rededor del punto q es $d^3P(q) = |\Psi(q,t)|^2 d^3q$.

Para que este postulado tenga sentido, es necesario que para cada t fijo se cumpla:

$$\int_{\Omega} |\Psi(q,t)|^2 d^3q = 1.$$

Siendo Ω la región *accesible* a la partícula, es decir, la región donde con certeza absoluta puede estar la partícula. Además, el espacio vectorial en el que se trabaja

¹Habitualmente $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$

son las funciones de cuadrado integrables, es decir, $L^2(\Omega)$. Es claro que Ψ debe ser al menos diferenciable y si Ω es finito; por lo tanto se tiene que $\Psi(q,t) = 0$ en la frontera y fuera de Ω .

Postulado 3.2. Para cada t , el espacio de las funciones de estado es un subespacio vectorial del espacio $L^2(\Omega)$. Es decir, para cada t , si Ψ_1 y Ψ_2 son funciones de onda, entonces:

$$\forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C} \Rightarrow \Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2,$$

es una posible función de onda, es decir, Ψ puede representar un posible estado del sistema.

Es decir, para cada t , cualquier combinación lineal de funciones es una posible función de onda. Por lo tanto, la ecuación de evolución que determine las funciones de onda debe ser lineal.

Postulado 3.3. La función de onda viene determinada por la Ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(q,t) + V(q,t) \Psi(q,t),$$

donde Δ es el laplaciano y V es el potencial al que esta sometida la partícula.

Postulado 3.4. A cualquier cantidad física medible A le asociaremos un operador hermitiano $\hat{A} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$. Además, dado un estado definido por una función de onda $\Psi(q,t)$ que define cierto estado del sistema, el valor medio de las medidas de A se define por:

$$\langle A \rangle(t) = \int_{\Omega} \overline{\Psi(q,t)} \left(\hat{A} \Psi(q,t) \right) d^3 q.$$

Se dice que un operador $\hat{A} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ es hermítico si:

$$\int_{\Omega} \overline{\Psi_1(q,t)} \left(\hat{A} \Psi_2(q,t) \right) d^3 q = \int_{\Omega} \left(\overline{\hat{A} \Psi_1(q,t)} \right) \Psi_2(q,t) d^3 q.$$

Postulado 3.5. El resultado de cualquier medición de una cantidad física medible A , debe ser autovalor del operador asociado \hat{A} y el estado asociado a dicha medición estará definida por su correspondiente autofunción.

Capítulo 4

MULTIPLICIDAD Y CONCENTRACIÓN DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER NO LINEAL CON FRECUENCIA CRÍTICA

El estudio de la Ecuación de Schrödinger no lineal es uno de los campos de investigación más destacados en la Mecánica Cuántica, debido a que permite determinar estados de la materia microscópica. Por ejemplo, para un grupo de partículas idénticas que interactúan unas con otras en estados ultra fríos, en particular, los condensados de Bose-Einstein, su evolución se describe, vía aproximaciones de Hartree, a un excelente grado de precisión por Ecuaciones no-lineales de Schrödinger. Además, la Ecuación de no-lineal de Schrödinger aparece con frecuencia en otros campos de la física, por ejemplo, cuando se describe la propagación de la luz en algunos materiales ópticos no lineales; ya que las Ecuaciones de Schrödinger en óptica no lineal se reducen a las ecuaciones de Maxwell, [6], [18], [25], [19].

En varios campos de la física esta ecuación se la utiliza de la siguiente manera:

$$i\hbar\Psi_t + \frac{\hbar^2}{2}\Delta\Psi - V_0(x)\Psi + |\Psi|^{p-1}\Psi = 0. \quad \forall x \in \mathbb{R}^N, \forall t \geq 0 \quad (4.1)$$

con $p > 1$. Este capítulo se centra en la existencia y propiedades cualitativas de las soluciones de ondas estacionarias de la ecuación (4.1), cuya forma es $\Psi(x, t) = v(x) * \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$, y en especial estudiaremos el comportamiento de estas soluciones cuando \hbar se aproxima a cero: el caso límite semiclásico descrito en [25] y [28]. Un ejemplo de este caso límite son los Condensados de Bose-Einstein que corresponden a varios estados de agregación de la materia (modificaciones a la temperatura o presión para determinada sustancia o elemento material, en relación a las fuerzas de unión de las partículas del elemento) que se da en ciertos materiales a temperaturas cercanas al cero absoluto.

En términos de v , el problema (4.1) se deriva de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= v(x) * \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right), \\ \Psi_t(x, t) &= \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} = v(x) * \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) * \left(\frac{-iE}{\hbar}\right), \\ \Delta\Psi(x, t) &= \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) * \Delta v(x), \end{aligned}$$

en consecuencia se tiene:

$$\begin{aligned}
 \text{a) } i\hbar\Psi_t(x,t) &= i\hbar * v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) * \left(\frac{-iE}{\hbar}\right), \\
 &= -i^2 * E * v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right), \\
 &= E * v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right). \\
 \text{b) } \frac{\hbar^2}{2}\Delta\Psi(x,t) &= \frac{\hbar^2}{2} * \Delta v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right). \\
 \text{c) } -V_0(x)\Psi(x,t) &= -V_0(x) * v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right). \\
 \text{d) } |\Psi(x,y)|^{p-1}\Psi(x,t) &= \left|v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)\right|^{p-1} * \left[v(x) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)\right], \\
 &= |v(x)|^{p-1}v(x) * \left|\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)\right|^{p-1} \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right).
 \end{aligned}$$

cuando sumamos todos los componentes, simplificamos los términos y dado que la ecuación es estacionaria; se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (4.2)$$

donde $\varepsilon^2 = \frac{\hbar^2}{2}$ y $V(x) = V_0(x) - E$. Además asumiremos que $N \geq 3$ y $(1+p) \in (2, 2^*)$, con $2^* = \frac{2N}{N-2}$.

Existen varios trabajos en los que se aborda el caso $\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > 0$. Por ejemplo, en el artículo [16], los autores toman en cuenta el caso unidimensional con $p = 3$, donde se prueba que existe una familia de soluciones que concentran la información alrededor de un punto crítico no degenerado del potencial, es decir, la información de la ecuación (4.2) se concentrará entorno a un máximo (mínimo) local o punto de ensilladura, cuyas coordenadas del eje de las ordenadas sean diferentes.

Notando a estas soluciones como v_ε , que fueron encontradas mediante el método de Lyapunov-Schmidt, se muestra que estas satisfacen:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \inf_{x \in \mathbb{R}^N} \max |v_\varepsilon(x)| > 0. \quad (4.3)$$

En los trabajos [30], [39], [34], [11], [12] y en algunos otros, las soluciones encontradas satisfacen la condición (4.3) y concentran la información en los puntos críticos del potencial $V(\cdot)$, mientras decaen exponencialmente hacia cero fuera de ellos. Los métodos expuestos en estos documentos para encontrar estas soluciones son diversos, entre los que destacan los métodos variacionales, reducciones de Lyapunov-Schmidt o una combinación de estos dos. Por ejemplo, para todas las

soluciones obtenidas cuando $\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > 0$ los valores máximos de las soluciones están limitadas por una constante mayor que cero; de hecho, son asintóticamente proporcionales al valor máximo de las soluciones de la ecuación.

En contraste con el caso del potencial positivo, los autores de [6] lo hacen para un dominio acotado $\Omega \subset \mathbb{R}^N$; además de discutir 3 casos importantes:

Flat Case: donde el interior de Ω es no vacío; es decir $\Omega = \overline{\text{int}(\Omega)} \neq \emptyset$.

Finite Case: Cuando Ω es un punto singular y $V(\cdot)$ se comporta como una función de orden finito cerca de Ω ; es decir, $\overline{\Omega}$ es un conjunto finito de puntos y el potencial $V(\cdot)$ tiene un decaimiento polinomial en Ω .

Infinite Case: Cuando Ω es un punto singular y V decrece exponencialmente cerca de Ω ; es decir, $\overline{\Omega}$ es un conjunto finito de puntos y el potencial $V(\cdot)$ tiene un decaimiento exponencial en Ω .

En este documento estudiaremos el *Flat Case*, donde el interior del conjunto $\overline{\Omega}$, donde el potencial V se anula, es un conjunto acotado no vacío. En este caso la ecuación límite se escribe:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (4.4)$$

En [6], Byeon & Wang prueban la existencia de una solución positiva, cuya solución de energía minimal para el problema (4.2) converge bajo condiciones de escalamiento a soluciones de energía minimal del problema (4.4).

Por otro lado, en [14], Felmer & Mayorga prueban que existen más soluciones de energía minimal. En particular y gracias a la Teoría de Lusternik - Schnirelman para funcionales [2][pág 141-155] se concluye que existen infinitas soluciones para este problema. Además se muestra que las soluciones del problema (4.2) son compatibles con las soluciones para el problema (4.4).

Con el fin de demostrar lo antes expuesto, supondremos que el potencial $V(\cdot)$ tiene la siguiente forma:

(V1) V es una función continua no negativa sobre \mathbb{R}^N ,

(V2) $V \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$,

(V3) $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ es conexo y frontera suave.

Nos referiremos a estas como condiciones como condiciones (V1) – (V3). Consideremos el siguiente funcional:

$$J_\varepsilon(w) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^N} \left(|\nabla w|^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} V(x)w^2 \right) dx. \quad (4.5)$$

Definimos además $M_\varepsilon = \{w \in H_\varepsilon : \|w\|_{L^{p+1}(\mathbb{R}^N)} = 1\}$, donde

$$H_\varepsilon = \left\{ w \in H^1(\mathbb{R}^N) : \|w\|_\varepsilon \equiv \left(\int_{\mathbb{R}^N} |\nabla w|^2 + \frac{V(x)}{\varepsilon^2} w^2 \right)^{1/2} < \infty \right\}.$$

Los puntos críticos del funcional J_ε sobre M_ε dan origen, a través de un apropiado escalamiento, a soluciones del problema (4.2). Ahora, consideremos el funcional asociado al problema (4.4):

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx, \quad (4.6)$$

definido sobre $M = \{u \in H_0^1(\Omega) : \|u\|_{L^{p+1}(\Omega)} = 1\}$. Por lo tanto, los puntos críticos de J sobre M son, por escalamiento, soluciones del problema (4.2).

Observación 4.1. Como se menciona en [6] y [14], una familia de funciones $\{f_\varepsilon\}_{\varepsilon>0}$ se dice que sub-converge en un espacio X , cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, si para cualquier sucesión $\{\varepsilon_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ converge a cero y es posible tomar una subsucesión $\{\varepsilon_{n_i}\}_{n_i \in \mathbb{N}}$ tal que $\{f_{\varepsilon_{n_i}}\}_{n_i \in \mathbb{N}}$ converge en X si $n_i \rightarrow \infty$

Teorema 4.1. [14] Consideremos que las condiciones (V1) – (V3) se cumplen, que $N \geq 3$ y $1 < p < \frac{N+2}{N-2}$; por lo tanto se tiene:

- i) Dado $\varepsilon > 0$, el funcional J_ε posee una infinidad de puntos críticos $\{\widehat{w}_{k,\varepsilon}\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M_\varepsilon$.
- ii) El funcional límite J posee infinitos puntos críticos $\{\widehat{w}_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M$.
- iii) Dado $k \in \mathbb{N}$, los valores críticos satisfacen:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} J_\varepsilon(\widehat{w}_{k,\varepsilon}) = J(\widehat{w}_k). \quad (4.7)$$

- iv) Dado $\delta, C, c > 0$ existe ε_0 tal que:

$$|\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| < C \exp \left\{ -\frac{c}{\varepsilon} \text{dist}(x, \Omega^\delta) \right\}, \quad \text{donde } \Omega^\delta = \{x \in \mathbb{R}^N : \text{dist}(x, \Omega) < \delta\}. \quad (4.8)$$

- v) En el límite de Ω , las funciones $\widehat{w}_{k,\varepsilon}$ verifican

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \max_{x \in \partial \Omega} |\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| = 0. \quad (4.9)$$

Las funciones $v_{k,\varepsilon} = (2\varepsilon^2 c_{k,\varepsilon})^{1/(p-1)} \widehat{w}_{k,\varepsilon}$ y $c_{k,\varepsilon} = J_\varepsilon(\widehat{w}_{k,\varepsilon})$ son soluciones del problema (4.2) y, como corolario, estas satisfacen para un $k \in \mathbb{N}$ fijo

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|v_{k,\varepsilon}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)} \equiv 0; \quad (4.10)$$

y

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \inf \frac{\|v_{k,\varepsilon}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)}}{\varepsilon^{2/(p-1)}} > 0. \quad (4.11)$$

Además, $w_k, \varepsilon = (2c_{k,\varepsilon})^{1/(p-1)} \widehat{w}_{k,\varepsilon}$ satisface la ecuación:

$$\begin{cases} \Delta w - \varepsilon^{-2} V(x)w + |w|^{p-1}w = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ w(x) = 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (4.12)$$

La propiedad (4.10) está en contraste con el caso no crítico $\inf_{x \in \mathbb{R}^N} V(x) > 0$, donde todas las soluciones de (4.2) están acotadas por una constante mayor que cero.

Valiéndonos de los conceptos matemáticos anteriores, introducimos el siguiente Teorema:

Teorema 4.2. *Sea $M \in \Sigma_E$ de clase C^1 una sub variedad de E y sea $f \in C^1(E)$. Supongamos que (M, f) satisface la condición de Palis-Smale [2] y*

$$C_k(f) = \inf_{A \in A_k(M)} \max_{u \in A} f(u), \quad (4.13)$$

donde

$$A_k(M) = \{A \in \Sigma_E \cap M : \gamma(A) \geq k\}. \quad (4.14)$$

Si $C_k(f) \in \mathbb{R}$ entonces $C_k(f)$ es un valor crítico para f . Además, si $c \equiv C_k(f) = \dots = C_{k+m}(f)$ entonces $\gamma(K_c) \geq m + 1$. En particular, si $m > 1$ entonces K_c , el conjunto de los puntos críticos correspondiente al valor c , contiene infinito número de elementos.

El funcional $J(u)$ (4.6) verifica el Teorema 4.2. Notaremos a $\Sigma = \Sigma_{H_0^1(\Omega)}$ y para $k \in \mathbb{N}$ se tiene:

$$A_k = A_k(M) \quad \text{y} \quad c_k = C_k(J) = J(\widehat{w}_k) \in (0, \infty)$$

En [14] se expone un problema intermedio entre (4.2) y (4.4), el mismo que muestra que dado $\delta > 0$, se define $\Omega^\delta = \{x \in \mathbb{R}^N : \text{dist}(x, \Omega) < \delta\}$, en el que se considera el siguiente problema:

$$\begin{cases} \Delta u - |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega^\delta; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega^\delta. \end{cases} \quad (4.15)$$

El Teorema 4.2 puede ser aplicado al problema (5.9) y por lo tanto este problema tiene infinitas soluciones.

4.1. Límites para los valores críticos

Esta parte del artículo está dedicada a dar las proposiciones, lemas y teoremas para probar (4.7) del Teorema 4.1. Para profundizar en las demostraciones, se puede revisar [14].

Además, los resultados de multiplicidad se basan en la categoría de Lusternik - Schnirelman para funcionales. El índice k de los valores críticos representa la característica topológica de nivel del conjunto, capturado gracias al género de Krasnoselski. En consecuencia, en [14] se prueba que para los conjuntos de nivel J_ε y J mediante la categoría de Lusternik - Schnirelman son equivalentes.

Teorema 4.3. *Para todo $k \in \mathbb{N}$ se tiene:*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} c_{k,\varepsilon} = c_k. \quad (4.16)$$

La demostración de este teorema se da a partir varios lemas, siendo la demostración de varios de ellos bastante técnica.

En cuanto al Teorema 4.3, este nos menciona que a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, los valores críticos del problema (4.2) tienden a los valores críticos del problema (4.4). Este Teorema es muy importante dado que si encontramos una sucesión de valores críticos $\{c_{k,\varepsilon}\}$, entonces esta sucesión converge a algún valor crítico c_k ; y más aún, esta solución se puede calcular mediante la ecuación (4.4).

4.2. Perfiles asintóticos y fenómeno de concentración

Estudiaremos el comportamiento asintótico de las soluciones dentro y fuera de Ω .

Lema 4.1. *Para cada $k \in \mathbb{N}$, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, $w_{k,\varepsilon}$ sub converge débilmente a $u_k \in H^1(\mathbb{R}^N)$ tal que la restricción en Ω es una solución de (4.4), con $J(\widehat{u}_k|_\Omega) = c_k$, para $\widehat{u}_k = 2c_k^{1/(1-p)} u_k$.*

Es pertinente una explicación del Lema 4.1; el mismo que muestra que si tomamos un $k \in \mathbb{N}$ y aminoramos ε de tal manera que $\varepsilon \rightarrow 0$ y encontramos una de las soluciones del problema (4.2), entonces esta solución $w_{k,\varepsilon}$ converge débilmente a una de las soluciones del problema (4.4), siempre y cuando esta solución esté dentro de un conjunto Ω descrito anteriormente.

Por lo tanto, nuestra tarea es encontrar una sucesión de soluciones particulares del problema (4.2), tomando en cuenta que cada solución depende no solo de ε sino también de $k \in \mathbb{N}$. Además, debemos “aprender a controlar” qué soluciones estamos capturando a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$ y si estas soluciones son las mismas respecto a los problemas (4.2) y (4.4); debido a que el conjunto de soluciones es infinito.

Para seguir estudiando el fenómeno de concentración, los siguientes lemas y proposiciones son muy importantes:

Lema 4.2. Para cada $k \in \mathbb{N}$, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, $w_{k,\varepsilon}$ sub converge en la norma de $H^1(\mathbb{R}^N)$ hacia u_k .

El objetivo de este lema es obtener el control exponencial del decaimiento de la familia $\{w_{k,\varepsilon}\}$ fuera de Ω . Para esto exponemos la siguiente proposición que se demuestra en [5] asumiendo que $D \subset \mathbb{R}^N$ tiene frontera suave y está acotada. Este resultado se puede extender a que D no sea necesariamente o regular en ∂D .

Proposición 4.1. Sea $D \subset \mathbb{R}^N$ un abierto conexo. Si w es una solución clásica de la desigualdad elíptica:

$$\begin{cases} \Delta w - f(w) \geq 0, & \text{en } D, \\ w > 0, & \text{en } D, \\ w = 0, & \text{sobre } \partial D. \end{cases} \quad (4.17)$$

donde $N \geq 3$, $(p+1) \in (2, 2^*)$ y f satisface

$$tf(t) \leq ct^{p+1} \quad \forall t \in \mathbb{R}^+. \quad (4.18)$$

Para alguna constante $c > 0$ y si $w \in H_0^1(D)$ entonces existe una constante $C = C(c, p, N)$ tal que

$$\|w\|_{L^\infty(D)} \leq C \|w\|_{L^{2^*(D)}}^{4/[(N+2)-p(N-2)]}. \quad (4.19)$$

La Proposición 4.1 muestra que existen desigualdades diferenciales, cuya solución está determinada al estudiar el conjunto D , la frontera ∂D y el principio del máximo general para ecuaciones no lineales, [17], que a grosso modo es tener una constante que “regule” la norma infinito $L^\infty(D)$. Para esto, son necesarios varios lemas que serán enunciados a continuación, cuyas demostraciones se encuentran en [14].

Lema 4.3. Para cada $k \in \mathbb{N}$ existe K_2 tal que

$$\|w_{k,\varepsilon}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^N)} < K_2, \quad \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_\delta). \quad (4.20)$$

Lema 4.4. Para cada $k \in \mathbb{N}$, $\delta, c > 0$ existe $\varepsilon_{**} \in (0, \varepsilon_\delta)$ tal que

$$|w_{k,\varepsilon}(x)| < C * \exp\left\{-\frac{c}{\varepsilon}, \text{dist}(x, \Omega^\delta)\right\}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^N, \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_{**}), \quad (4.21)$$

donde C depende de K_2 y Ω^δ .

Estos lemas determinan que existe un problema asociado a (4.2) y (4.4) en el sentido en que la desigualdad diferencial es un problema intermedio entre estas dos ecuaciones, donde existe un conjunto Ω^δ con las mismas características que la ecuación límite (4.4), que permite entrelazar las ecuaciones que nos interesan para poderlas comparar y así modelarlas numéricamente estableciendo un $\delta > 0$ dentro de la frontera $\partial\Omega^\delta$ que contiene a la frontera $\partial\Omega$.

4.3. Comportamiento asintótico en la frontera

A partir de los lemas anteriores sabemos que la sucesión $\{w_{k,\varepsilon}\}$ converge en $H^1(\mathbb{R})$ [4, Cap 8] a una función u que es solución del problema (4.4) en Ω . Por otro lado, fuera de Ω , que se nota como Ω^δ , se tiene un decaimiento exponencial de acuerdo al Lema 4.4. Por lo tanto, hace falta cubrir el comportamiento uniforme de $w_{k,\varepsilon}$ sobre la frontera de Ω .

Proposición 4.2. *La familia de soluciones $w_{k,\varepsilon}$ verifica*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \max_{x \in \partial\Omega} |w_{k,\varepsilon}(x)| = 0, \quad \forall k \in \mathbb{N} \quad (4.22)$$

La Proposición 4.2 es muy relevante, debido a que determina el comportamiento que tienen las soluciones de los problemas estudiados en este capítulo. Si bien en [6] se estudia el *Flat Case*, no se lo hace tan al detalle como se muestra en [14]; documento que estudia de manera rigurosa las consecuencias de los lemas, proposiciones y teoremas demostrados.

En este sentido, la Proposición 4.2 nos muestra que a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, la familia de soluciones $w_{k,\varepsilon}$ se van acercando entre sí; y por lo tanto, se puede encontrar una sucesión convergente de soluciones del problema (4.2), las mismas que se pueden estar lo suficientemente cerca como se quiera a una de las soluciones del problema (4.4).

Capítulo 5

ESTUDIO NUMÉRICO DEL COMPORTAMIENTO CUALITATIVO DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN NO-LINEAL DE SCHRÖDINGER CON FRECUENCIA CRÍTICA

El objetivo de este Capítulo es estudiar numéricamente la ecuación:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (5.1)$$

en relación al problema límite:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (5.2)$$

para dimensión uno. Por lo tanto, las ecuaciones en derivadas parciales se convierten en derivadas totales.

Para nuestro estudio hemos realizado los experimentos con las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 v'' - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, \\ v(-3) = v(3) = 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

cuyo problema límite asociado es:

$$\begin{cases} u'' + |u|^{p-1}u = 0, \\ u(-2) = u(2) = 0. \end{cases} \quad (5.4)$$

En este sentido, nuestro fin es estudiar el comportamiento numérico de las soluciones de la Ecuación no-lineal de Schrödinger; para lo cual hemos recurrido a aproximaciones sucesivas determinadas por algoritmos matemáticos numéricos que detallamos en capítulos anteriores.

En el Capítulo 4 se demuestra que la ecuación (5.1), sujeta a las condiciones:

- (V1) V es una función continua no negativa sobre \mathbb{R}^N ,
- (V2) $V \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$,
- (V3) $\Omega = \text{int}\{x \in \mathbb{R}^N | V(x) = 0\} \neq \emptyset$ es conexo y frontera suave.

que debe cumplir el potencial $V(\cdot)$, y la ecuación (5.2) tienen infinitas soluciones obtenidas en el contexto de la Categoría de Lusternik - Schnirelman. Además, se demuestra que las soluciones de estas ecuaciones son compatibles entre sí, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$.

En este apartado experimentaremos numéricamente con estas dos ecuaciones, mediante experimentos sucesivos.

Es importante mencionar que el estudio numérico del comportamiento cualitativo de soluciones de la Ecuación No-Lineal de Schrödinger con frecuencia crítica no es un problema trivial ni fácil de formular. Tuvimos que construir varias veces el esquema numérico de resolución del problema y reformularlo de varias maneras para poder establecer las primeras relaciones entre estas dos ecuaciones.

En principio, tomamos como estrategia resolver estos problemas mediante los métodos numéricos clásicos que se utilizan para hallar soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden. Se intentó resolver, sin éxito, los dos problemas antes mencionados mediante métodos de Euler, correctores - predictores y Runge Kutta; sin embargo, el principal problema que se suscitaba fue que la ecuación límite (5.2) es no-lineal y tiene infinitas soluciones. Adicionalmente usamos el método del disparo acoplado a un Runge Kutta 4.

Por completitud añadimos el resultado principal de [14]:

Teorema 5.1. *Consideremos que las condiciones (V1) – (V3) se cumplen, que $N \geq 3$ y $1 < p < \frac{N+2}{N-2}$; por lo tanto se tiene:*

i) Dado $\varepsilon > 0$, el funcional J_ε posee una infinidad de puntos críticos $\{\widehat{w}_{k,\varepsilon}\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M_\varepsilon$.

ii) El funcional límite J posee infinitos puntos críticos $\{\widehat{w}_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset M$.

iii) Dado $k \in \mathbb{N}$, los valores críticos satisfacen:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} J_\varepsilon(\widehat{w}_{k,\varepsilon}) = J(\widehat{w}_k). \quad (5.5)$$

iv) Dado $\delta, C, c > 0$ existe ε_0 tal que:

$$|\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| < C \exp\left\{-\frac{c}{\varepsilon} \text{dist}(x, \Omega^\delta)\right\}, \quad \text{donde } \Omega^\delta = \{x \in \mathbb{R}^N : \text{dist}(x, \Omega) < \delta\}. \quad (5.6)$$

v) En el límite de Ω , las funciones $\widehat{w}_{k,\varepsilon}$ verifican

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \max_{x \in \partial\Omega} |\widehat{w}_{k,\varepsilon}(x)| = 0. \quad (5.7)$$

Uno de los primeros procedimientos que se utilizaron para realizar la experimentación numérica fue utilizar el método de diferencias finitas lineales, para lo cual redefinimos los problemas (5.1) y (5.2); que en términos de diferencias finitas de segundo orden se tiene:

$$\begin{cases} u'' \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}, \\ u' \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}. \end{cases} \quad (5.8)$$

En consecuencia, se tiene el siguiente esquema en diferencias finitas:

$$u_{i+1} = u_i(2 - h^2|u_i|^{p-1}) - u_{i-1}.$$

Uno de los problemas a los que tuvimos que hacerle frente fue que no teníamos explícitamente la primera derivada. Por lo tanto, en una primera aproximación, asumimos que la primera derivada es constante como lo muestra la siguiente ecuación:

$$u_{i-1} = u_{i+1} - 2kh, \quad \text{con } k \text{ constante fijada anteriormente al definir la primera derivada.} \blacksquare$$

A partir de esto se obtuvo el siguiente sistema iterativo:

$$u_{i+1} = u_i \left(1 - \frac{h^2}{2} |u_i|^{p-1} \right) + \frac{kh}{2},$$

$$u_i = 0.$$

Sin embargo, no se obtuvieron resultados significativos sino triviales porque uno de los supuestos era pensar que la primera derivada iba a permanecer constante.

Consecuentemente, decidimos darle un nuevo enfoque a nuestro problema. Basándonos en los trabajos [1] y [37], en los que se describen algunas estrategias para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales no lineales con condiciones en la frontera mediante el método del disparo, dedujimos que una buena aproximación para hacer nuestros experimentos sería utilizar los criterios mencionados en estos documentos.

Como se describe en la sección 2.4.3, lo primordial para que este método funcione son los ángulos de tiro iniciales; y ya que las soluciones encontradas dependerán de estos, es natural pensar en que se deberá realizar una de corrección de estos ángulos.

Para realizar este proceso de corrección se utilizó el método de la secante. Utilizar este método se convirtió en una estrategia vital al momento de realizar nuestros experimentos porque, debido a la no linealidad de nuestro problema y a la multiplicidad de soluciones, podemos tener “cierto control” respecto a estas soluciones. Luego de varios intentos y comparaciones, se programó una rutina en SciLab tomando en cuenta todas estas consideraciones.

5.1. Introducción a las experimentaciones preliminares

Para realizar los experimentos, es importante definir el conjunto Ω que básicamente es cuando el potencial $V(\cdot)$ se anula, conjunto en el cual la ecuación (5.2) va a ser estudiada. Por lo tanto, tenemos dos referentes para los experimentos globales:

- la ecuación de Schrödinger (5.1) y;
- la ecuación límite (5.2).

En cuanto al conjunto Ω , hemos definido intervalos simétricos respecto a cero; los cuales se definen como el intervalo $[-2, 2]$ para la ecuación límite (5.2) mientras que para el problema (5.1) será el intervalo $[-3, 3]$, en vista que $V(\cdot)$ explota al infinito a medida que $v(x) \rightarrow 0$ cuando $|x| \rightarrow \infty$ y se debe hacer una discretización de este problema. Además, hemos fijado a p con el valor de 2.

La elección del intervalo $[-3, 3]$ en reemplazo del $(-\infty, \infty)$ presentado en [14] se da con el fin de probar el Teorema 4.1. En efecto, en [14] se utiliza el problema intermedio:

$$\begin{cases} \Delta u - |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega^\delta; \\ u = 0 & \text{sobre } \partial\Omega^\delta. \end{cases} \quad (5.9)$$

donde $\Omega^\delta = \{x \in \mathbb{R}^N : \text{dist}(x, \Omega) < \delta\}$ y $\delta > 0$.

En nuestro caso, hemos tomado como $\delta = 1$. Además, en vista que las soluciones de las ecuaciones a estudiar presentan el fenómeno de concentración al rededor del conjunto Ω y el decaimiento exponencial fuera de este conjunto, es razonable hacer las discretizaciones respecto a los límites en los que las ecuaciones (5.1) y (5.2) serán analizadas.

5.2. Experimentaciones con frecuencia no crítica

En principio definimos a $V(\cdot)$ como una sucesión regularizante o “mollifier” [4], la misma que fue construida como una función perteneciente a C_o^∞ . Este caso es cuando se tratan frecuencias no críticas [16] y por lo tanto es un problema diferente al que nos interesa modelar; sin embargo, creemos pertinente describir su comportamiento ya que al cambiar las condiciones del problema, los experimentos también se comportan de diferente manera. Además, el intervalo utilizado para la ecuación (5.1) fue $[-10, 10]$ en reemplazo del $(-\infty, \infty)$ con el mismo criterio anterior y presentado en detalle en [14].

El potencial $V(\cdot)$ utilizado para este estudio fue el siguiente:

$$V(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{100 - |x|^2}\right), & \text{si } -10 < x < -2, \\ 0, & \text{si } x \in [-2, 2], \\ \exp\left(-\frac{1}{100 - |x|^2}\right), & \text{si } 2 < x < 10. \end{cases} \quad (5.10)$$

Utilizamos el Método del Disparo para estimar las soluciones de las ecuaciones (5.1) y (5.2), para lo cual es necesario estimar los ángulos iniciales de tiro que en ambos casos son los mismos.

En estos experimentos pudimos constatar que la convergencia de soluciones es mucho más rápida y también calculamos la distancia $L^2(\Omega)$ entre las soluciones

encontradas. Como ejemplo mostramos el contraste entre soluciones encontradas de este tipo, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$:

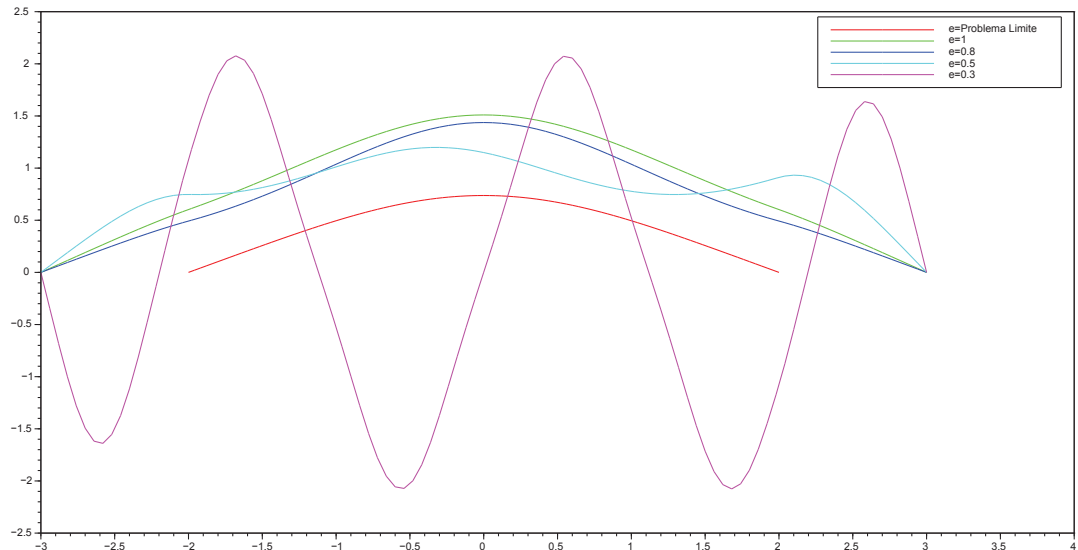


FIGURA 5.1. Experimentos con potencial tipo mollifier

Como muestra la Figura 5.1, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$ las soluciones del problema (5.1) se aproximan a una solución del problema (5.2).

Finalmente, adjuntamos una tabla resumen de las soluciones encontradas para la ecuación (5.1) con este tipo de potencial:

Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,990	$[-10, 10]$	1	2	6	1,5604085
0,900	$[-10, 10]$	1	2	7	1,3807169
0,800	$[-10, 10]$	1	2	5	1,1978517
0,700	$[-10, 10]$	1	2	10	1,0316862
0,600	$[-10, 10]$	1	2	8	2,9012888
0,500	$[-10, 10]$	1	2	6	2,7880382
0,400	$[-10, 10]$	1	2	5	2,4316157
0,300	$[-10, 10]$	1	2	7	2,1328833
0,200	$[-10, 10]$	1	2	6	2,1561256
0,100	$[-10, 10]$	1	2	5	1,9923845
0,050	$[-10, 10]$	1	2	10	2,1410100

CUADRO 5.1. Problema Original con potencial tipo mollifier

Además, la tabla descriptiva para la ecuación (5.2) es la siguiente:

Problema Límite			
Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones
$[-2, 2]$	1	2	8

CUADRO 5.2. Problema Límite con potencial tipo mollifier

5.3. Experimentaciones con frecuencia crítica

En lo que resta del documento tomamos potenciales de acuerdo a lo estipulado en el Capítulo 4, con lo que las aproximaciones a la solución fueron más interesantes, no triviales y además se nota la multiplicidad de soluciones de los problemas (5.1) y (5.2).

Para realizar nuestros experimentos seleccionamos el siguiente potencial $V(\cdot)$:

$$V(x) = \begin{cases} \exp(-4 - |x|^2) - 1, & \text{si } -3 < x < -2, \\ 0, & \text{si } x \in [-2, 2], \\ \exp(-4 - |x|^2) - 1, & \text{si } 2 < x < 3. \end{cases} \quad (5.11)$$

En contraste a la Sección 5.2 es necesario realizar algunas modificaciones al Método del Disparo debido a no linealidad y la frecuencia crítica de los problemas a analizar, para lo cual hemos combinado este método con un *Runge Kutta 4* con el fin de estimar los nuevos ángulos de tiro a partir de los ángulos de tiro iniciales. Además de este método híbrido hemos fijado una tolerancia de 1×10^5 y un máximo de 90 iteraciones, las mismas que también sirven para buscar una mejor aproximación respecto a los ángulos de tiro α_1 y α_2 que se definen al inicio como primeras aproximaciones a la solución.

Puesto que las ecuaciones están relacionadas entre sí y cada una de ellas tiene infinitas soluciones en el contexto de la categoría de Lusternik - Schnirelmann, nuestro trabajo consistió en “atrapar” soluciones semejantes a las del problema (5.2), a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$ en el problema (5.1).

Es por esta razón que fue necesario variar los ángulos de tiro a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$ y ajustarlos para que la solución obtenida en el problema (5.2) no se aleje de la solución de la ecuación (5.1).

Para saber si las soluciones se “acercan entre sí”, hemos calculado la distancia $L^2(\Omega)$; la misma que determina si una solución es semejante a otra si la distancia entre estas tiende a cero; o en términos matemáticos:

$$\left(\int_{\Omega} |f_1(x) - f_2(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \approx 0. \quad (5.12)$$

Es decir, si encontramos una solución de la ecuación (5.1) $w_\varepsilon(x)$, la distancia $L^2(\Omega)$ respecta a una solución de la ecuación (5.2) $u(x)$ es:

$$\left(\int_{-2}^2 |w_\varepsilon(x) - u(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

A medida que esta distancia tiende a cero, las soluciones son semejantes.

Como se indicó, procedimos a realizar los experimentos variando los ángulos de tiro y disminuyendo ε con una tasa de 0,05.

En los cuadros siguientes se muestra la evolución de las soluciones de las ecuaciones (5.1) y (5.2).

Problema Límite			
Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones
$[-2, 2]$	100	45	13

CUADRO 5.3. Problema Límite

Observación 5.1. Es importante mencionar que α_1 y α_2 son los ángulos iniciales que sirven como aproximaciones a priori para encontrar alguna solución de los problemas (5.1) y (5.2). Es importante mencionar que si los ángulos son diferentes, entonces las soluciones encontradas podrían ser diferentes también.

En el cuadro 5.3, los valores de α_1 y α_2 son los ángulos iniciales de tiro para calcular una solución del problema (5.2); cuyo gráfico es el siguiente:

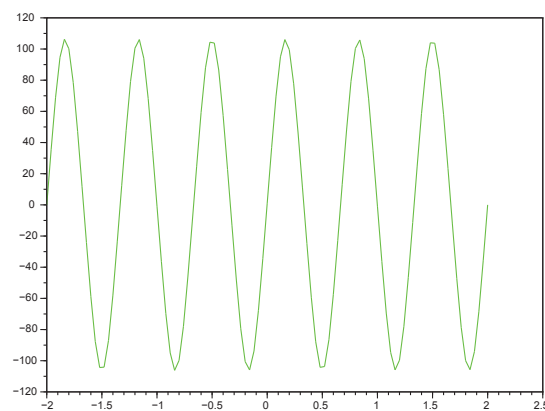


FIGURA 5.2. Una solución del problema límite

Además, presentamos una tabla resumida¹ de los resultados principales de los

¹La tabla completa se encuentra en el Apéndice C

experimentos de las soluciones encontradas del problema (5.1), junto con la distancia $L^2(\Omega)$ respecto a la solución del problema (5.2) representada en la Figura 5.2

Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,990	$[-3, 3]$	2	100	39	256,461005
0,900	$[-3, 3]$	1	100	6	166,658434
0,800	$[-3, 3]$	99	100	6	83,4048956
0,700	$[-3, 3]$	100	44	7	87,1502114
0,600	$[-3, 3]$	100	38	10	161,580716
0,500	$[-3, 3]$	100	74	10	166,256333
0,400	$[-3, 3]$	100	99	8	171,121823
0,350	$[-3, 3]$	17	100	24	181,065476

CUADRO 5.4. Problema Original

Como muestra la Figura 5.4 no existe convergencia entre una solución del problema límite y las aproximaciones del problema original. Esto nos llevó a realizar una discriminación por el número de veces que la solución cambia de signo, cuyo criterio está relacionado con el Género de Krasnoselski $\gamma(\cdot)$ y que tiene que ver con el número de máximos que alcanza cada solución.

Por lo tanto, se hizo esta discriminación en las soluciones encontradas y los resultados de este análisis se encuentra en la siguiente Sección.

5.4. Análisis de Resultados

En el Apéndice C se muestra que en la Tabla C.4 el mínimo valor al cual se pudo hacer las aproximaciones fue cuando ε toma el valor de 0,350. Este valor no fue posible hacerlo más pequeño a pesar de extender la malla de iteraciones o utilizar otros ángulos de tiro; por lo que es necesario una super computadora para estimar nuevas soluciones a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$.

Además, los cuadros C.1, C.2, C.3 y C.4 sugieren que se clasifique de mejor manera las soluciones encontradas bajo el criterio de convergencia de Cauchy:

Definición 5.1. Se dice que $\{Z_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy si existe Z_∞ tal que

$$\forall \varepsilon > 0, \exists N > 0 : m, n > N \Rightarrow \|Z_n - Z_m\| < \varepsilon$$

En este criterio de convergencia no es necesario un candidato a límite y en un espacio de Banach la sucesión $\{Z_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es convergente; es decir, existe Z_∞ tal que

$$Z_n \rightarrow Z_\infty \quad \text{cuando} \quad n \rightarrow \infty$$

En virtud que $L^p(\Omega)$ es un espacio de Banach y por el Lema 4.1, podemos tomar como una aproximación a la última solución encontrada del problema (5.1).

Finalmente, el criterio para ordenar y clasificar las soluciones encontradas fue discriminar mediante el número de veces que la solución cambia de signo o el número de veces que la solución alcanzó un máximo local en el conjunto Ω . Con este criterio, establecimos que existen entre 5 y 22 máximos locales, de los cuales, la gran mayoría tienen funciones “semejantes” para establecer la distancia $L^2(\Omega)$.

En los gráficos y tablas siguientes se resumen las distancias segmentadas por número de máximos locales; los mismos que denotan un mejoramiento en cuanto a la distancia entre una función y otra.

Por ejemplo, si tomamos 7 máximos locales, tenemos los siguientes esquemas:

7 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,970	59,7658072
0,900	42,4364977
0,835	26,8452901
0,825	24,4977832
0,725	2,15674829

CUADRO 5.5. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 7 máximos locales

El gráfico correspondiente de la evolución del comportamiento de las soluciones respecto a la distancia L^2 es el siguiente:

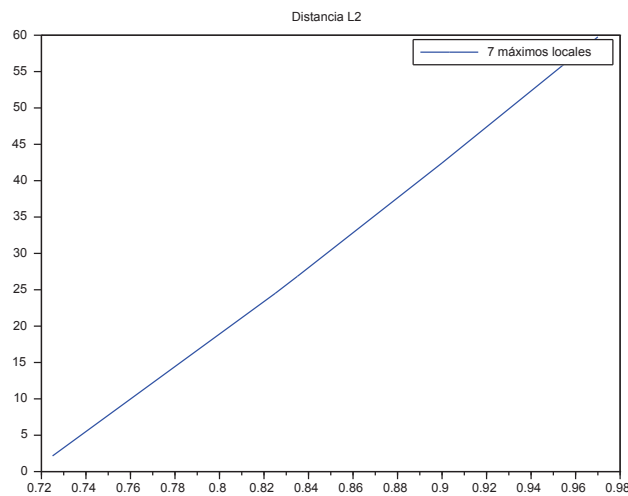


FIGURA 5.3. Gráfico de distancias para 7 máximos locales

Se puede ver una tendencia claramente descendente y aproximadamente con una tendencia lineal. Este fenómeno lo podemos ver en otros experimentos más adelante.

Siguiendo con las demás tablas y gráficos, evidenciamos el correspondiente a 8 máximos locales.

8 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,995	201,926905
0,965	165,963832
0,905	32,6609479
0,890	27,9111046
0,870	21,5957235
0,860	18,4578547
0,855	16,896199
0,840	12,2392854
0,815	4,54325525
0,810	3,01986568
0,805	1,50486377

CUADRO 5.6. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 8 máximos locales

El gráfico correspondiente al cuadro 5.6 de la distancia L^2 es el siguiente:

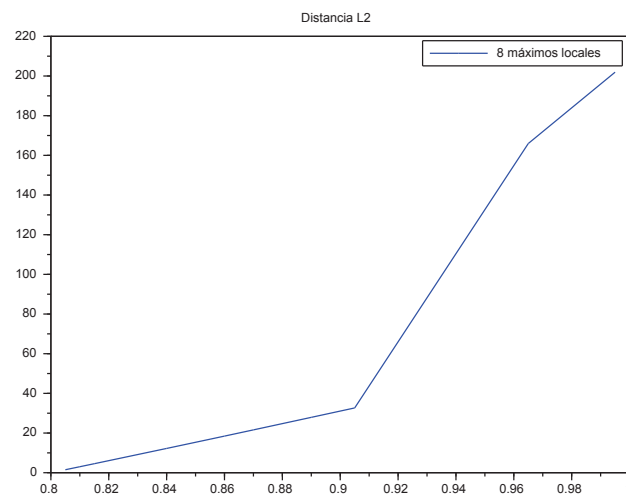


FIGURA 5.4. Gráfico de distancias para 8 máximos locales

Cuando tenemos 10 máximos locales, los esquemas son los siguientes:

10 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,990	217,542718
0,960	148,738002
0,945	142,127376
0,940	227,783562
0,935	225,846153
0,930	224,265259
0,925	221,984202
0,920	131,182000
0,655	140,585349
0,650	134,202057
0,640	15,2148687
0,635	13,3045260
0,615	5,68475972

CUADRO 5.7. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 10 máximos locales

El gráfico correspondiente al cuadro 5.7 es el siguiente:

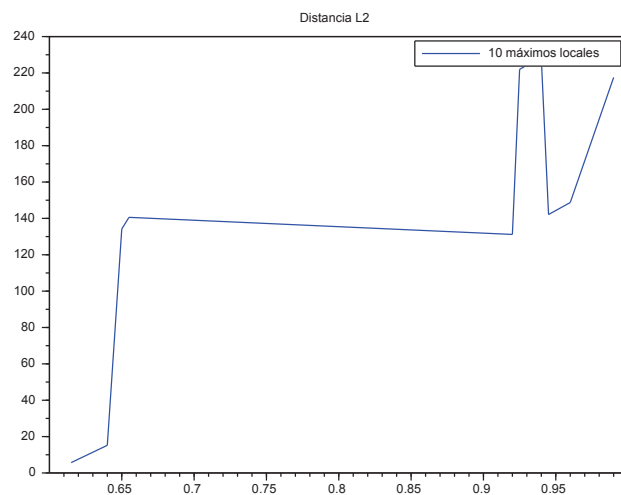


FIGURA 5.5. Gráfico de distancias para 10 máximos locales

A pesar que los valores en esta sucesión son descendentes, podemos ver q esta función no se asemeja a una recta.

Para 11 máximos locales se encontraron estos resultados:

11 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,980	322,992471
0,630	58,268279
0,625	137,704344
0,605	45,9438241
0,590	129,350024
0,585	128,167915
0,580	33,4812933
0,575	125,854761
0,570	28,5744143
0,565	26,1168328
0,560	23,6718018

CUADRO 5.8. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 11 máximos locales

El gráfico correspondiente al cuadro 5.8 es el siguiente:

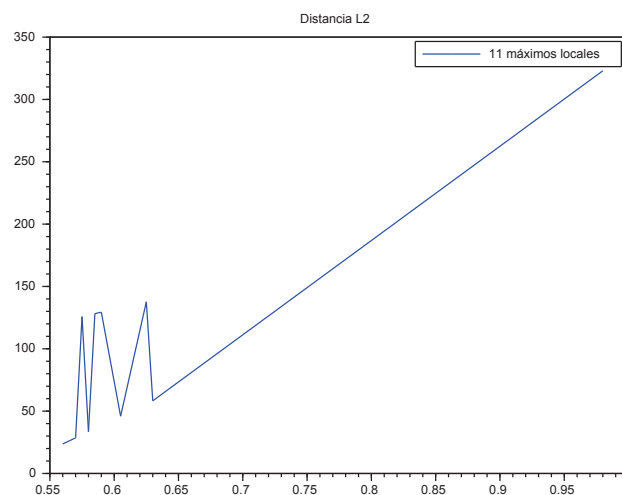


FIGURA 5.6. Gráfico de distancias para 11 máximos locales

Podemos ver el gráfico 5.6 no tiene una secuencia lógica de decadencia; sin embargo, se observa que la distancia entre estas funciones decrece.

Los siguientes cuadros corresponden a 12 máximos locales.

12 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,555	36,8088466
0,550	33,8802790
0,545	30,9462269
0,535	25,1689420
0,530	22,3339525
0,520	16,7180787
0,515	13,8831739

CUADRO 5.9. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 12 máximos locales

Cuyo gráfico es:

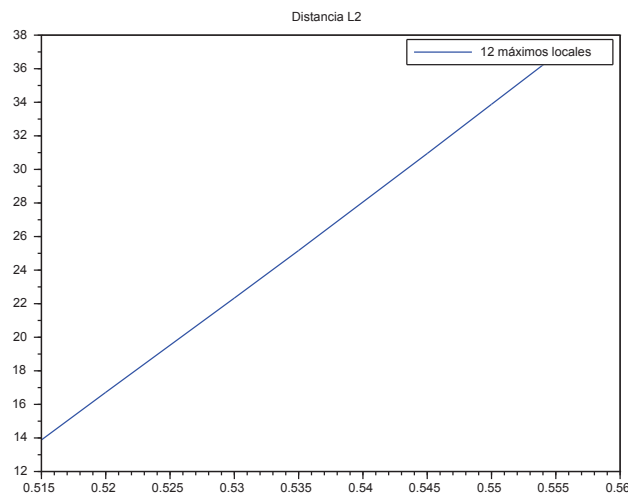


FIGURA 5.7. Gráfico de distancias para 12 máximos locales

Volvemos a constatar una decrecimiento cuasi - lineal, con valores suficientemente buenos y cercanos en cuanto a la distancia L^2 .

Para el caso cuando tenemos 15 máximos locales se tiene:

15 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,480	199,860159
0,465	145,305755
0,460	142,991317
0,455	140,839083
0,445	62,2118151
0,440	57,8582216
0,435	53,4586401
0,430	49,0891538
0,375	5,13823211

CUADRO 5.10. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 15 máximos locales

El gráfico para esta tabla es el siguiente:

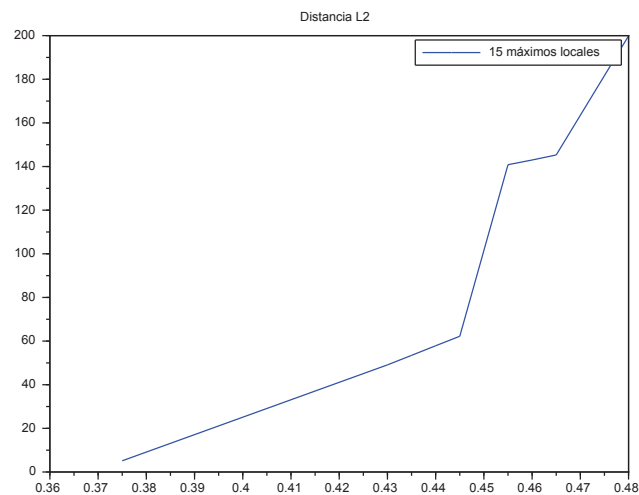


FIGURA 5.8. Gráfico de distancias para 15 máximos locales

Seguimos obteniendo funciones decrecientes respecto a la distancia L^2 cuando las comparamos con el decaimiento de ε .

Cuando se tienen 15 máximos locales, encontramos que existen más de dos soluciones para ser comparadas respecto a sus distancias. Para los casos en los que se encontraron dos o menos soluciones, de hicieron gráficos comparativos entre las soluciones; de los cuales solo hemos incluido el correspondiente a a 17 máximos locales, en vista que se puede obtener una mejor visualización del fenómeno de concentración de soluciones.

En consecuencia tenemos el cuadro siguiente:

16 máximos locales	
ε	Distancia L^2
0,425	164,559064
0,415	12,0285861
0,410	8,10592696

CUADRO 5.11. Distancia L^2 respecto a la última solución encontrada con 16 máximos locales

Cuyo gráfico es el siguiente:

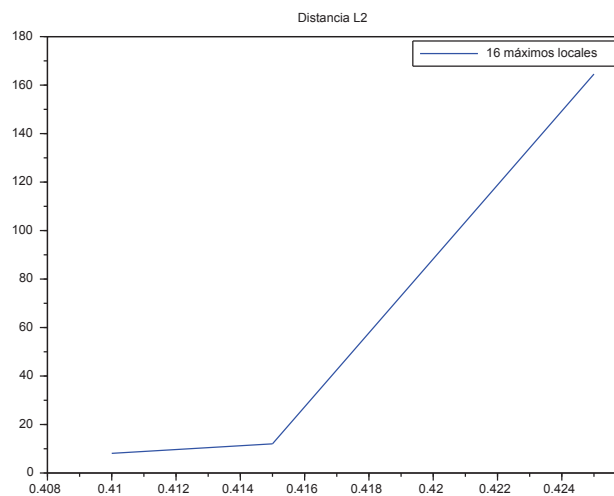


FIGURA 5.9. Gráfico de distancias para 16 máximos locales

El gráfico muestra, de nuevo, una función decreciente respecto a la última solución encontrada del problema (5.1).

Por lo tanto, podemos ver que el fenómeno de concentración se aplica en cada caso y que las funciones de la distancia L^2 respecto a la disminución del ε siempre son decrecientes.

Finalmente, mostramos un gráfico comparativo de la última solución encontrada y la penúltima solución encontrada respecta a la ecuación (5.1), cuando se tienen 17 y 18 máximos locales.

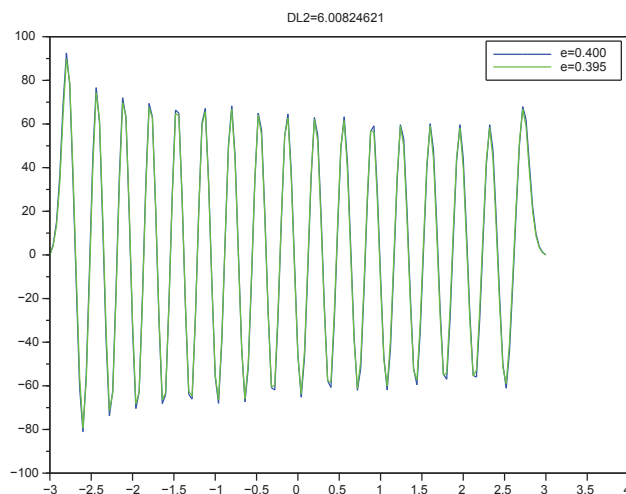


FIGURA 5.10. Gráfico comparativo entre dos soluciones encontradas cuando se tienen 17 máximos locales

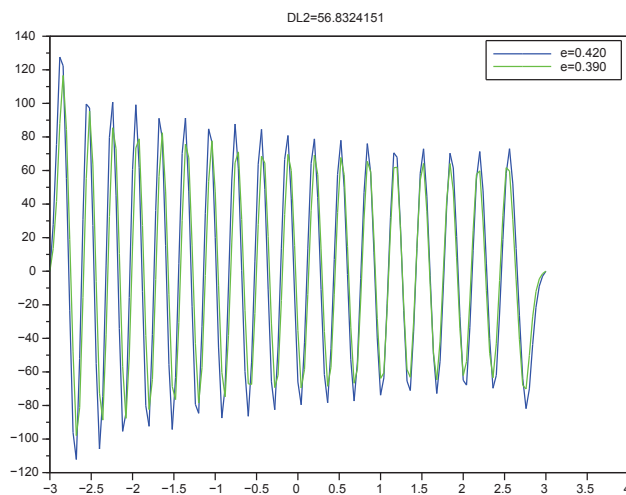


FIGURA 5.11. Gráfico comparativo entre dos soluciones encontradas cuando se tienen 18 máximos locales

Capítulo 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1. Conclusiones

- (a) La meta de esta tesis fue estudiar numéricamente el comportamiento cualitativo de soluciones de la ecuación

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta v - V(x)v + |v|^{p-1}v = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N; \\ v(x) \rightarrow 0, & \text{cuando } |x| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (6.1)$$

en relación con soluciones del problema límite:

$$\begin{cases} \Delta u + |u|^{p-1}u = 0, & \text{en } \Omega; \\ u = 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{cases} \quad (6.2)$$

para el caso unidimensional. La motivación principal fueron los resultados de multiplicidad y concentración de información obtenidos por Felmer & Mayorga, [14].

En este sentido, en el Capítulo 5 se mostró de manera experimental que a medida que $\varepsilon \downarrow 0$, las soluciones del problema (6.1) convergen a soluciones del problema (6.2).

Para lograr esto se adaptó un método numérico híbrido que combina el Método del Disparo y el Método de Runge Kutta 4 para determinar una sucesión de soluciones de la ecuación (6.1). En efecto, para hallar esta sucesión se realizaron varios ajustes en los ángulos iniciales de tiro del Método del Disparo y corregidos por el método de Runge Kutta de cuarto orden. Además, a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, los ángulos de tiro iniciales debían ser cambiados hasta volver a encontrar el siguiente término de la sucesión de soluciones en la que estábamos trabajando; esto debido a la multiplicidad de soluciones de las ecuaciones anteriormente anunciadas. En efecto, [1] y [37] muestran un nuevo Método del Disparo para ecuaciones diferenciales no lineales; los mismos que sirvieron como arquetipo al momento de diseñar el código para los experimentos.

Finalmente se hizo una clasificación de las secuencias numéricas conforme al número de veces que las soluciones encontradas cambian de signo, lo cual está directamente relacionado con la categoría de Ljusternik - Schnirelman vía el género de Krasnoselki, y se determinó que se acercan una a la otra por medio de la distancia $L^2(\Omega)$. En el límite, una solución de la ecuación (6.1) converge a una solución de (6.2), lo cual fue probado estrictamente por FELMER & MAYORGA en [14].

- b) Para poder realizar esta experimentación para dimensión uno fueron necesarias

herramientas, conocimientos y conceptos de varias ramas de la Matemática como el Análisis Funcional, Cálculo Variacional, Análisis Numérico, Física Cuántica, Ecuaciones Diferenciales Parciales (elípticas no lineales). Fue necesario leer varios artículos que aportaban desde las perspectivas anteriores al objetivo del trabajo. Estos conceptos no son triviales y se tradujo en un esfuerzo adicional para obtener resultados satisfactorios basados en el trabajo de FELMER & MAYORGA y poder contrastar estos resultados con los resultados teóricos mostrados en [14].

- (c) Debido a que el trabajo fue arduo para abordar el problema en dimensión 1, preveemos que la dificultad de incrementará radicalmente para dimensiones 2 o superiores, debido especialmente a la presencia de la no linealidad de la Ecuación de Schrödinger. Esta conjetura la hacemos debido al contraste mostrado en el Capítulo 5, donde se comparó los casos no crítico y crítico. Entre las principales diferencias podemos mencionar las siguientes:

Diferencias Importantes		
	Caso no crítico	Caso crítico
Dificultad en el modelamiento	media	alta
Variación de ángulos iniciales de tiro	ausente	presente
Dificultad en la búsqueda de soluciones	media	alta
Discriminación para diferenciar soluciones	ausente	presente

CUADRO 6.1. Tabla de contraste

6.2. Recomendaciones

- (a) Creo que una gran falencia en los estudiantes de pregrado es que no nos enseñan los principios de investigación científica, por lo que es muy difícil graduarse. Además, en el proyecto de titulación es fundamental una buena guía de un tutor dedicado y serio, pues el estudiante puede fracasar y conformarse con estar egresado o realizar un trabajo de baja calidad.
- (b) La Escuela Politécnica Nacional debería ser el alma mater de las ciencias y para lograrlo se debería fortalecer el Departamento de Matemática dando apertura a todos los docentes que regresan al país con el objetivo de enseñar matemáticas en la Facultad de Ciencias, independiente del área en el que se hayan especializado. Esto beneficiaría mucho al país porque tendríamos un departamento diverso e inclusivo, consciente de los desafíos futuros y dotado de la experiencia necesaria para realizar investigación con colegas matemáticos de otras áreas de especialización. En este sentido, la investigación matemática sería mejor llevadera y menos solitaria.

Apéndice A

TÓPICOS DEL ANÁLISIS FUNCIONAL

Proposición A.1 (Propiedad Arquimedean). *Dados $a, b \in \mathbb{R}^+$, existe $n \in \mathbb{N}$ tal que $n \cdot a > b$.*

Teorema A.1 (Bolzano-Weierstrass). *Toda sucesión acotada de números reales posee una subsucesión convergente.*

En un contexto general, la Mecánica Cuántica se desarrolla en el campo de los números complejos \mathbb{C} , por lo cual asumiremos que \mathbb{E} es un espacio vectorial complejo. De la misma manera, diremos que \bar{z} es el complejo conjugado del número complejo z .

Definición A.1. Espacio Métrico: [23] Un espacio métrico es un par (X, d) , donde X es un conjunto y d es una métrica definida sobre X . La función de distancia se define como el producto cartesiano entre X y X , es decir $X \times X$ tal que para cada $x, y, z \in X$ se tiene:

- a). d es finita y no negativa.
- b). $d(x, y) = 0$ si y solo si $x = y$.
- c). $d(x, y) = d(y, x)$.
- d). $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$

Una sucesión $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subseteq X$ es de Cauchy si para todo $\varepsilon > 0$ existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que:

$$n, m \geq n_0 \Rightarrow d(x_n, x_m) < \varepsilon$$

Observación A.1. El espacio (X, d) es completo si toda sucesión de Cauchy converge.

Definición A.2. Espacio Euclídeo [27] Se dice que espacio vectorial \mathbb{E} es un espacio euclídeo si dados dos elementos cualquiera $x, y \in \mathbb{E}$ existe un número denominado producto escalar $\langle x, y \rangle$ tal que:

- a). $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle} \quad \forall x, y \in \mathbb{E}$.
- b). $\langle x, y + z \rangle = \langle x, y \rangle + \langle x, z \rangle \quad \forall x, y, z \in \mathbb{E}$.
- c). $\langle x, \lambda y \rangle = \lambda \langle x, y \rangle \quad \forall x, y \in \mathbb{E} \quad \lambda \in \mathbb{C}$.
- d). $\langle x, x \rangle > 0 \quad \forall x \in \mathbb{E}, x \neq 0$. Si $\langle x, x \rangle = 0 \Rightarrow x = 0$.

Observación A.2. Si un espacio Euclídeo es completo, entonces es un espacio de Hilbert. Para un espacio Euclídeo.

Definición A.3. Espacio Normado: [23] Un espacio normado es un par $(X, \|\cdot\|)$ formado por un espacio vectorial X y una “norma” $\|\cdot\|$ con las siguientes propiedades:

- a). $\|x\| \geq 0$.
- b). $\|x\| = 0$ si y solo si $x = 0$.
- c). $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$.
- d). $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Observación A.3. Si un espacio $(X, \|\cdot\|)$ es completo, entonces este espacio es un espacio de Banach.

Para poder definir los espacios reflexivos, es necesaria la siguiente definición:

Definición A.4. [4] La topología débil $\sigma(E, E')$ sobre E es la topología menos fina sobre E que hace continuas a todas las aplicaciones $(\phi_f)_{f \in E'}$.

Definición A.5. [4] **Espacios reflexivos:** Sea E un espacio de Banach y sea J la inyección canónica de E en E'' . Se dice que E es reflexivo si $J(E) = E''$.

Definición A.6. [4] **Espacios separables:** Se dice que un espacio métrico es separable si existe un subconjunto $D \subset E$ numerable y denso.

Seguiremos con una definición importante:

Definición A.7. Sea $p \in [1, \infty)$, se define

$$\ell^p(\mathbb{C}) = \left\{ (u_i)_{i \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{C} : \sum_{i=1}^{\infty} |u_i|^p < \infty \right\},$$

que es un espacio de Banach con la norma

$$\|(u_i)_{i \in \mathbb{N}}\|_{\ell^p(\mathbb{C})} = \left(\sum_{i=1}^{\infty} |u_i|^p \right)^{1/p}.$$

En el caso de $\ell^2(\mathbb{C})$, se define el producto interno

$$((x_i)_{i \in \mathbb{N}}, (y_i)_{i \in \mathbb{N}}) = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{x}_i y_i, \quad \text{para todo } (x_i)_{i \in \mathbb{N}}, (y_i)_{i \in \mathbb{N}} \in \ell^2(\mathbb{C}).$$

Se tiene que $\ell^2(\mathbb{C})$ con la norma inducida por el producto interno es un espacio de Hilbert. Además, cualquier espacio de Hilbert separable de dimensión infinita es isomorfo a $\ell^2(\mathbb{C})$.

Definición A.8. Espacio de Hilbert: Si un espacio euclídeo \mathbb{E} es completo respecto a la norma inducida por un producto escalar, entonces se dice que este espacio es un Espacio de Hilbert. Denotaremos a este tipo de espacios con la letra \mathbb{H} .

Además, se presentan las desigualdades clásicas de Hölder y Minkowsky:

Proposición A.2. Sean $p \geq 1$ y $(\xi_i)_{i \in \mathbb{N}}, (\eta_i)_{i \in \mathbb{N}} \in \ell^p(\mathbb{C})$. Entonces

$$\left(\sum_{i=1}^{\infty} |\xi_i + \eta_i|^p \right)^{1/p} \leq \left(\sum_{i=1}^{\infty} |\xi_i|^p \right)^{1/p} + \left(\sum_{i=1}^{\infty} |\eta_i|^p \right)^{1/p},$$

conocida como desigualdad de Minkowsky. Además si $q \in [1, \infty)$ tal que

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1,$$

se tiene la desigualdad de Hölder

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\xi_i \eta_i| \leq \left(\sum_{i=1}^{\infty} |\xi_i|^p \right)^{1/p} \cdot \left(\sum_{i=1}^{\infty} |\eta_i|^q \right)^{1/q}.$$

Para una función suave $f : M \rightarrow \mathbb{R}$, donde el conjunto de los puntos críticos se notará como K en una variedad compacta, sea:

$$M_a = f^{-1}] -\infty, a] \quad \text{y} \quad K_a = K \cap f^{-1}(a)$$

Además, ϕ se define como $\phi : M \times \mathbb{R} \rightarrow M$ con $\phi(x_0)(0) = \nabla f(x_0)$ para todo $x_0 \in M$.

Teorema A.2. [10] **Teorema de la deformación:** Dado $c \in \mathbb{R}$ y cualquier vecindad abierta U de K_c en M , existe $\varepsilon > 0$ tal que $\phi_1(M_{c+\varepsilon} - U) \subseteq M_{c-\varepsilon}$, donde ϕ_1 es la aplicación del flujo del gradiente.

Algunos Conceptos de la Teoría de la Medida

Definición A.9. [8] σ -álgebra

M es una σ -álgebra sobre un conjunto Ω si M es una familia de subconjuntos de Ω tal que:

- a) $\emptyset \in M$
- b) Si $A \in M \Rightarrow A^c \in M$
- c) $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in M$ si $A_n \in M \quad \forall n$

Definición A.10. [8] **Medida:** μ es una medida; es decir, $\mu : M \rightarrow [0, \infty]$ si satisface las siguientes condiciones:

- a) $\mu(\emptyset) = 0$
- b) Para toda sucesión de elementos disjuntos $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de M ,

$$\mu \left(\bigcup_{n \in \mathbb{N}} A_n \right) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \mu(A_n)$$

Esta propiedad se llama σ -aditividad de μ .

Apéndice B

TÓPICOS DE ALGUNOS MÉTODOS TOPOLÓGICOS DE ANÁLISIS NO LINEAL PARA PROBLEMAS ELÍPTICOS

Sean X, Y dos espacios de Banach. Definimos la siguiente ecuación:

$$F(\lambda, u) = 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (\text{B.1})$$

donde

$$F : \mathbb{R} \times X \rightarrow Y$$

es una aplicación dependiente de un parámetro real λ . Además, $F \in C^2(\mathbb{R} \times X, Y)$.

Denotaremos a $S = \{(\lambda, u) \in \mathbb{R} \times X : u \neq 0, F(\lambda, u) = 0\}$ al conjunto de las soluciones no triviales de la ecuación (B.1).

Definición B.1. Diremos que λ^* es un punto de bifurcación para F (para la solución trivial), si existe una sucesión $(\lambda_n, u_n) \in \mathbb{R} \times X$ con $u_n \neq 0$ y $F(\lambda_n, u_n) = 0$ tal que:

$$(\lambda_n, u_n) \rightarrow (\lambda^*, 0).$$

Definimos el siguiente tipo de ecuaciones:

$$F(\lambda, u) = \lambda u - G(u) = 0$$

donde G satisface:

(G1) $G \in C(X, X)$ y es diferenciable en $u = 0$, con derivada (compacta) $A = G'(0)$.

(G2) G es compacto.

Se entiende que $G(0) = 0$.

Los siguientes teoremas son de vital importancia en los capítulos subsiguientes.

Teorema B.1 (Krasnoselskii). *Supongamos que (G1) y (G2) se cumplen y sea λ^* un valor propio de A con multiplicidad algebraica impar. Entonces λ^* es un punto de bifurcación de F .*

Teorema B.2 (Rabinowitz). *Supongamos que (G1) y (G2) se cumplen y sea λ^* un valor propio de A con multiplicidad algebraica impar. Entonces λ^* bifurca a un conjunto conexo cerrado continuo Σ de soluciones no triviales de $F = 0$, y se cumple una de las dos siguientes características:*

- i) Σ es no acotado.
- ii) Σ admite otro valor propio $\nu \neq \lambda^*$ de A .

Teorema B.3 (Krasnoselskii). *Suponga que $G \in C^1(X, X)$ es un operador variacional y satisface (G2), entonces cualquier valor propio de $A = G'(0)$ es un punto de bifurcación para $F = 0$.*

Tópicos del cálculo variacional

Introduciremos algunos conceptos del cálculo variacional que nos ayudan en nuestro estudio.

Definición B.2. Un homeomorfismo se da cuando se tienen X, Y dos espacios topológicos y f una función tal que $f : X \rightarrow Y$:

1. f es una biyección,
2. f es continua; y
3. f^{-1} es continua.

Definición B.3. Carta: Una carta es un par (U, ϕ) donde U es un abierto de un conjunto X y $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ es un homeomorfismo

Definición B.4. Variedad de Banach: Sea E un espacio de Banach y M un espacio topológico. Decimos que M es una variedad de Banach de clase C^k , con $k \in [0, \infty]$ si existe una colección de cartas (U, ϕ) , donde U son abiertos que cubren a M ; donde $\phi : U \rightarrow \phi(U) \subset E$ es un homeomorfismo con $\phi(U)$ abierto y además, si (ψ, V) es otra carta de M , entonces $\phi \circ \psi^{-1} : \psi(U \cap V) \subseteq E \rightarrow E$ es de clase C^k .

Apéndice C

TABLA DE SOLUCIONES ENCONTRADAS EN LA EXPERIMENTACIÓN

La siguiente tabla contiene los resultados de la experimentación de la ecuación (5.1) respecto a una solución de la ecuación (5.2) representada en el Figura 5.2, con la respectiva distancia $L^2(\Omega)$ calculada a partir de estas soluciones.

Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,995	$[-3, 3]$	1	100	15	200,894842
0,990	$[-3, 3]$	2	100	39	256,461005
0,985	$[-3, 3]$	5	100	12	291,015051
0,980	$[-3, 3]$	5	100	20	288,134813
0,975	$[-3, 3]$	21	100	7	167,757404
0,970	$[-3, 3]$	10	100	8	169,637229
0,965	$[-3, 3]$	1	100	18	181,241168
0,960	$[-3, 3]$	11	100	18	215,87076
0,955	$[-3, 3]$	5	100	12	242,46434
0,950	$[-3, 3]$	18	100	15	217,238706
0,945	$[-3, 3]$	6	100	13	212,426996
0,940	$[-3, 3]$	28	100	24	237,433475
0,935	$[-3, 3]$	2	100	19	235,778581
0,930	$[-3, 3]$	3	100	17	212,803269
0,925	$[-3, 3]$	1	100	12	232,503821
0,920	$[-3, 3]$	5	100	11	206,938721
0,915	$[-3, 3]$	30	100	10	71,2828744
0,910	$[-3, 3]$	24	100	10	71,9978336
0,905	$[-3, 3]$	80	100	11	87,4041282
0,900	$[-3, 3]$	1	100	6	166,658434
0,895	$[-3, 3]$	29	100	10	155,667098
0,890	$[-3, 3]$	86	100	14	86,3955492
0,885	$[-3, 3]$	77	100	11	75,7744367
0,880	$[-3, 3]$	30	100	13	76,5573167
0,875	$[-3, 3]$	57	100	16	77,3435898
0,870	$[-3, 3]$	27	100	12	85,2424637

CUADRO C.1. Problema Original

Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,865	[-3,3]	83	100	10	145,946096
0,860	[-3,3]	84	100	9	84,7631791
0,855	[-3,3]	14	100	11	84,5512457
0,850	[-3,3]	3	100	12	81,2599233
0,845	[-3,3]	4	100	11	168,714297
0,840	[-3,3]	92	100	15	84,0263909
0,835	[-3,3]	86	100	10	164,90946
0,830	[-3,3]	11	100	12	84,4537736
0,825	[-3,3]	85	100	11	164,71536
0,820	[-3,3]	75	100	11	153,377342
0,815	[-3,3]	99	100	8	83,4888449
0,810	[-3,3]	96	100	12	83,4380675
0,805	[-3,3]	99	100	8	83,4094732
0,800	[-3,3]	99	100	6	83,4048956
0,795	[-3,3]	99	100	7	83,4261394
0,790	[-3,3]	98	100	13	83,4738627
0,785	[-3,3]	92	100	11	83,5476332
0,780	[-3,3]	87	100	9	83,6427003
0,775	[-3,3]	78	100	19	94,4068337
0,770	[-3,3]	100	79	12	83,8751469
0,765	[-3,3]	100	77	8	84,0078259
0,760	[-3,3]	26	100	12	97,2839634
0,755	[-3,3]	78	100	11	84,315415
0,750	[-3,3]	100	68	9	84,4938239
0,745	[-3,3]	66	100	11	84,6876997
0,740	[-3,3]	63	100	7	84,89811
0,735	[-3,3]	100	43	12	85,1265289
0,730	[-3,3]	100	58	9	85,3706928
0,725	[-3,3]	28	100	9	163,30005
0,720	[-3,3]	100	53	8	85,9069979
0,715	[-3,3]	100	36	12	163,244823
0,710	[-3,3]	100	81	9	86,4995629
0,705	[-3,3]	100	46	9	86,8169588
0,700	[-3,3]	100	44	7	87,1502114
0,695	[-3,3]	100	42	9	87,5001357
0,690	[-3,3]	100	40	10	87,8671804
0,685	[-3,3]	100	38	6	88,2533329
0,680	[-3,3]	100	36	11	88,6601366
0,675	[-3,3]	100	47	16	163,958067

CUADRO C.2. Problema Original

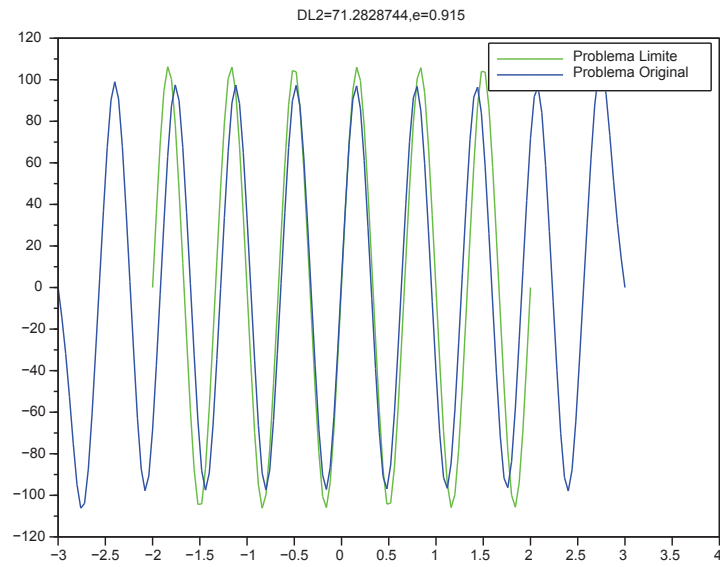
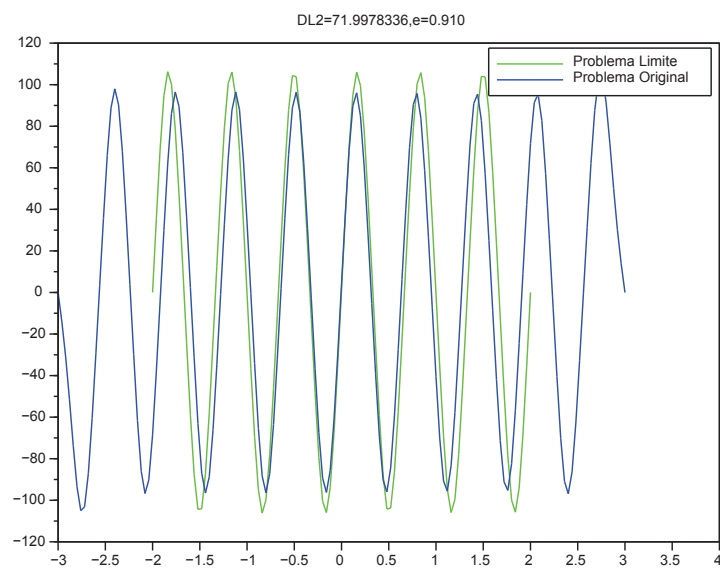
Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,670	$[-3,3]$	100	5	10	150,024192
0,665	$[-3,3]$	100	31	8	89,9766691
0,660	$[-3,3]$	100	58	11	115,415331
0,655	$[-3,3]$	48	100	10	178,703148
0,650	$[-3,3]$	100	44	14	162,099404
0,645	$[-3,3]$	100	25	8	91,8581397
0,640	$[-3,3]$	100	61	8	165,011568
0,635	$[-3,3]$	100	58	12	164,55686
0,630	$[-3,3]$	71	100	8	169,861429
0,625	$[-3,3]$	100	95	9	170,551177
0,620	$[-3,3]$	100	97	11	164,199019
0,615	$[-3,3]$	100	89	10	162,78381
0,610	$[-3,3]$	100	84	11	140,372009
0,605	$[-3,3]$	100	99	8	167,55345
0,600	$[-3,3]$	100	38	10	161,580716
0,595	$[-3,3]$	100	3	10	155,674632
0,590	$[-3,3]$	100	63	9	166,220901
0,585	$[-3,3]$	100	98	11	165,627854
0,580	$[-3,3]$	100	75	10	165,603124
0,575	$[-3,3]$	100	96	14	164,483344
0,570	$[-3,3]$	100	65	11	164,881832
0,565	$[-3,3]$	100	61	8	164,539907
0,560	$[-3,3]$	100	93	12	164,206672
0,555	$[-3,3]$	100	98	9	165,410363
0,550	$[-3,3]$	100	87	9	164,825481
0,545	$[-3,3]$	100	81	8	164,262445
0,540	$[-3,3]$	100	69	9	173,589162
0,535	$[-3,3]$	100	70	7	163,185299
0,530	$[-3,3]$	100	65	8	162,665457
0,525	$[-3,3]$	100	82	10	172,224917
0,520	$[-3,3]$	100	91	13	161,67993
0,515	$[-3,3]$	100	93	13	161,21761
0,510	$[-3,3]$	100	26	9	161,269613
0,505	$[-3,3]$	100	81	9	167,082476
0,500	$[-3,3]$	100	74	10	166,256333
0,495	$[-3,3]$	100	86	7	165,462338
0,490	$[-3,3]$	100	61	13	159,082901
0,485	$[-3,3]$	100	57	8	163,939194
0,480	$[-3,3]$	100	74	13	178,161003
0,475	$[-3,3]$	100	47	6	162,480726

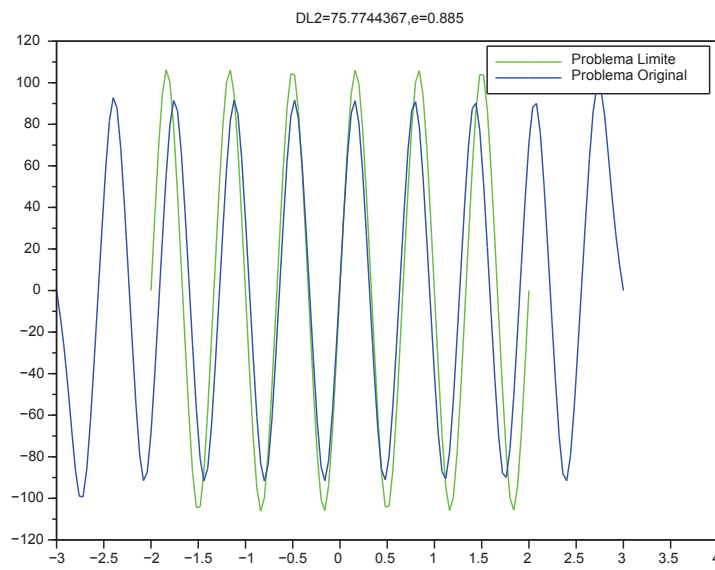
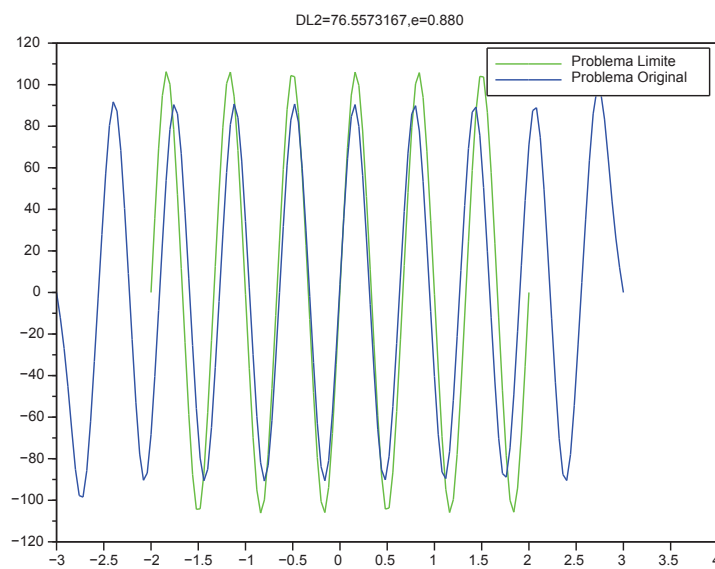
CUADRO C.3. Problema Original

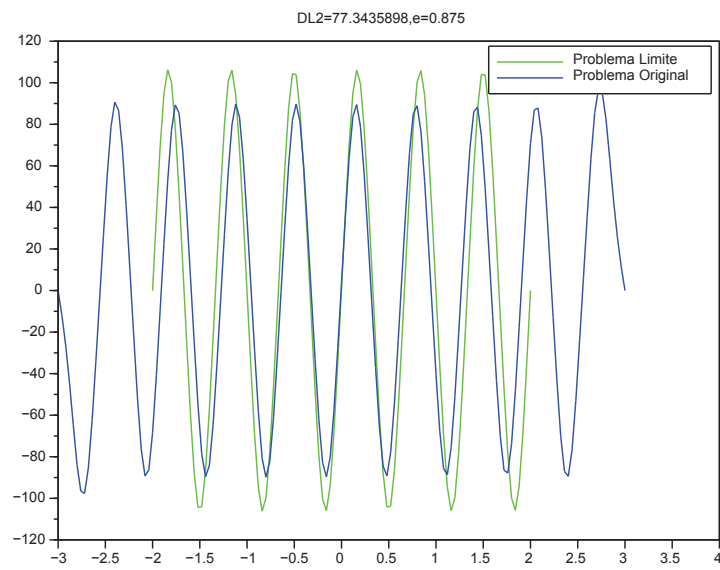
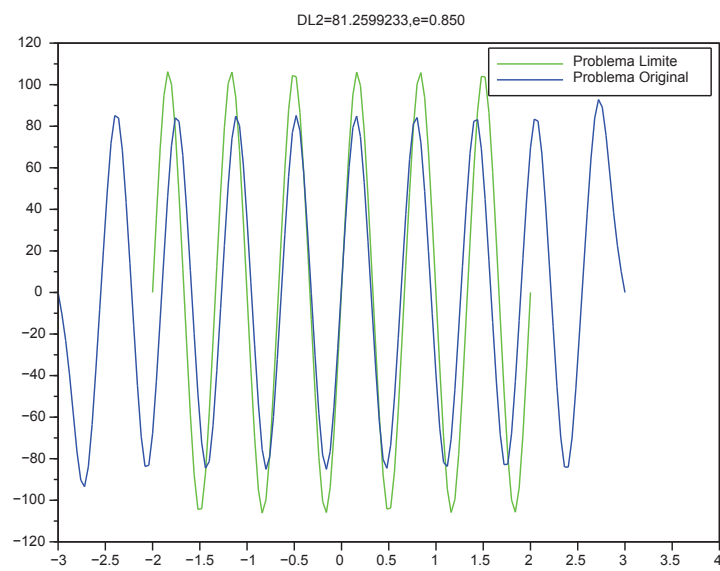
Problema Original					
ε	Intervalo	α_1	α_2	Número de iteraciones	Distancia L^2
0,470	$[-3,3]$	100	31	7	164,099691
0,465	$[-3,3]$	100	99	9	176,694372
0,460	$[-3,3]$	100	94	10	175,827192
0,455	$[-3,3]$	100	84	8	174,96893
0,450	$[-3,3]$	100	15	11	159,341877
0,445	$[-3,3]$	100	93	12	175,873894
0,440	$[-3,3]$	100	83	9	174,759301
0,435	$[-3,3]$	100	75	9	173,677668
0,430	$[-3,3]$	100	90	11	172,636651
0,425	$[-3,3]$	100	85	8	172,951146
0,420	$[-3,3]$	100	41	10	189,000292
0,415	$[-3,3]$	100	99	7	174,401996
0,410	$[-3,3]$	100	90	11	173,31235
0,405	$[-3,3]$	100	80	9	172,183248
0,400	$[-3,3]$	100	99	8	171,121823
0,395	$[-3,3]$	100	86	10	170,212128
0,390	$[-3,3]$	100	78	20	179,649358
0,385	$[-3,3]$	100	98	11	183,168135
0,380	$[-3,3]$	3	100	14	198,121982
0,375	$[-3,3]$	100	16	8	162,371344
0,370	$[-3,3]$	100	14	9	161,556118
0,360	$[-3,3]$	8	100	12	172,828668
0,350	$[-3,3]$	17	100	24	181,065476

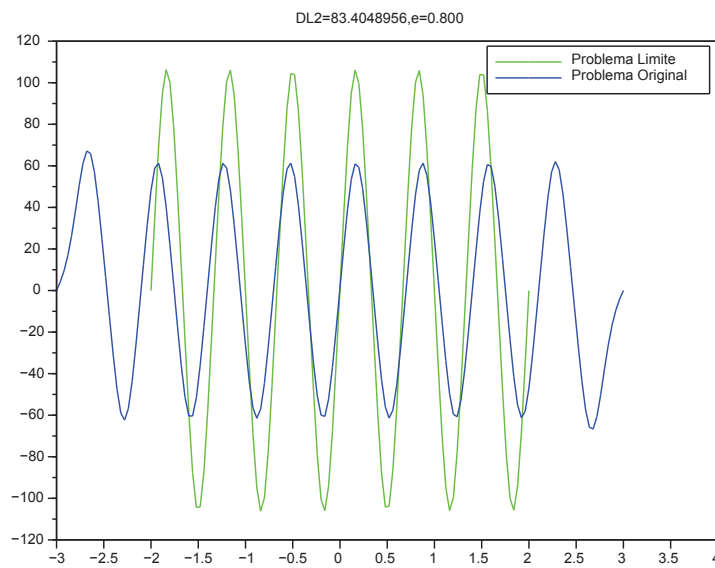
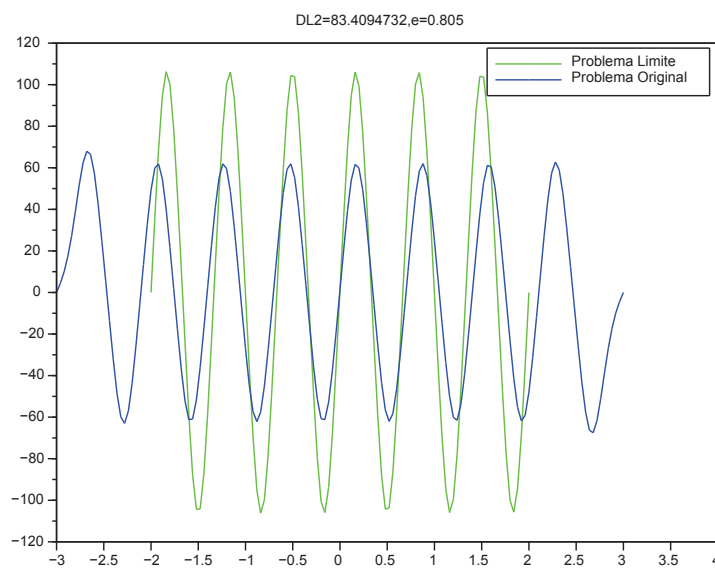
CUADRO C.4. Problema Original

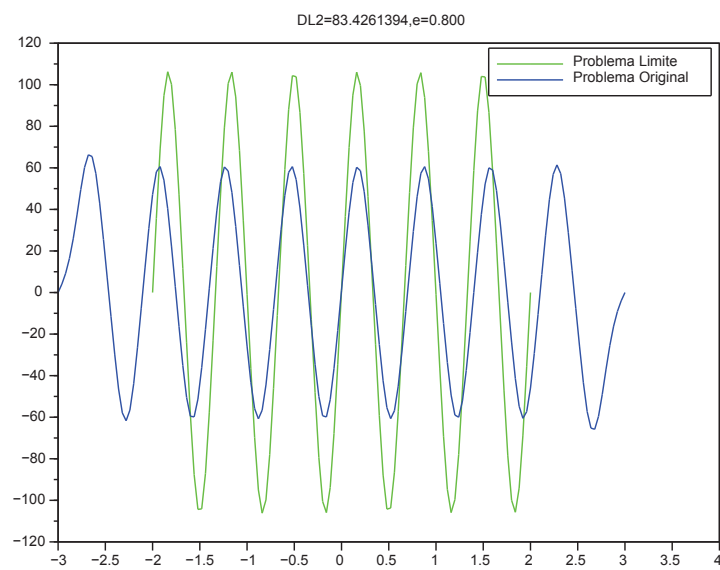
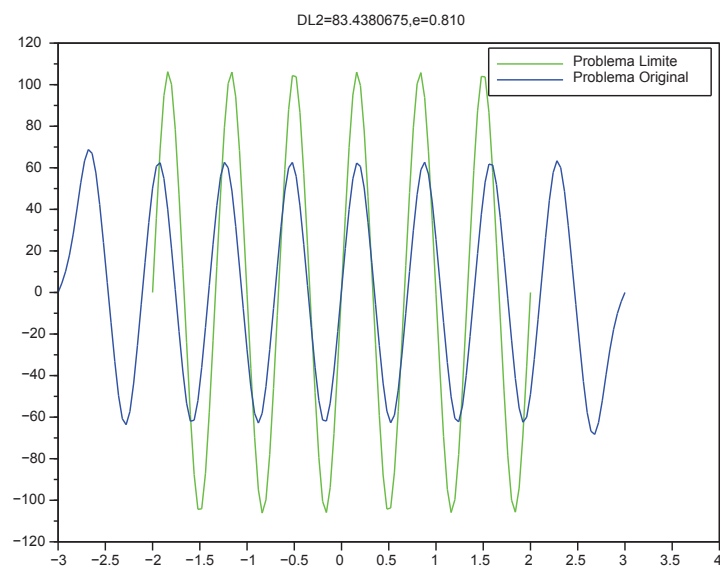
Además, presentamos diez gráficos cuya distancia $L^2(\Omega)$ son las distancias más pequeñas entre todas las experimentaciones realizadas, respecto a las soluciones de los problemas (5.1) y (5.2).

FIGURA C.1. Experimento con $\varepsilon = 0,915$ FIGURA C.2. Experimento con $\varepsilon = 0,910$

FIGURA C.3. Experimento con $\varepsilon = 0,885$ FIGURA C.4. Experimento con $\varepsilon = 0,880$

FIGURA C.5. Experimento con $\varepsilon = 0,875$ FIGURA C.6. Experimento con $\varepsilon = 0,850$

FIGURA C.7. Experimento con $\varepsilon = 0,800$ FIGURA C.8. Experimento con $\varepsilon = 0,805$

FIGURA C.9. Experimento con $\varepsilon = 0,795$ FIGURA C.10. Experimento con $\varepsilon = 0,810$

BIBLIOGRAFÍA

- [1] M. AHSAN, S. FARRUKH, *A new tipe of shooting method for non-linear boundary value problems*, Alexandria Engineering Journal, <http://www.elsevier.com/locate/aej>, (2013).
- [2] A. AMBROSETTI, & A. MALCHIODI, *Nonlinear Analysis and Semilinear Elliptic Problems*, Cambridge University, 2006.
- [3] F. BOMBAL, *Los espacios abstractos y el análisis funcional*, Departamento de Análisis Matemático, Universidad Complutense de Madrid, (2000).
- [4] H. BREZIS, *Analyse Fonctionnelle*, Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise, Masson, Paris, 1983.
- [5] J. BYEON, *Existence of large positive solutions of some nonlinear elliptic equations on singularly perturbed domains*, Comm. Partial Differential Equations, 22 (1997), pp. 1731–1769.
- [6] J. BYEON AND Z.-Q. WANG, *Standing waves with a critical frequency for nonlinear Schrödinger equations*, Arch. Ration. Mech. Anal., 165 (2002), pp. 295–316.
- [7] S. CAMBELL, J. CHANCELIER, AND R. NIKOUKHAH, *Modeling and Simulation in Scilab/Scicos with ScicosLab 4.4*, North Carolina State University, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées & INRIA, 2010.
- [8] D. CHAMORRO, *Espacios de Lebesgue y de Lorentz, Volumen 1*, Unidad de Publicaciones de la Facultad de Ciencias de la Escuela Politécnica Nacional, Quito, 2010.
- [9] K. CHANG, *Methods in Nonlinear Analysis*, School of Mathematical Sciences, Beijing, 2003.
- [10] O. CORNEA, G. LUPTON, J. OPREA, AND D. TANRÉ, *Lusternik - Schnirelmann Category*, American Mathematical Society, USA, 2003.
- [11] M. DEL PINO AND P. L. FELMER, *Local mountain passes for semilinear elliptic problems in unbounded domains*, Calc. Var. Partial Differential Equations, 4 (1996), pp. 121–137.
- [12] ———, *Semi-classical states of nonlinear Schrödinger equations: a variational reduction method*, Math. Ann., 324 (2002), pp. 1–32.
- [13] L. EVANS, *Partial Differential Equations*, vol. 19 of Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, RI, 1998.
- [14] P. FELMER AND J. MAYORGA-ZAMBRANO, *Multiplicity and concentration for the nonlinear Schrödinger equation with critical frequency*, Nonlinear Analysis, 66/1 (2007), pp. 151–169.

- [15] R. FEYNMAN, R. LEIGHTON, AND M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Quantum Mechanics, Vol III*, Bilingüa, Addison-Wesley Publishing Company, Instituto Tecnológico de California, 1965.
- [16] A. FLOER AND A. WEINSTEIN, *Nonspreading wave packets for the cubic Schrödinger equation with a bounded potential*, J. Funct. Anal., 69 (1986), pp. 397–408.
- [17] D. GILBARG AND N. S. TRUDINGER, *Elliptic partial differential equations of second order*, vol. 224 of Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], Springer-Verlag, Berlin, second ed., 1983.
- [18] J. GRATTON, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Buenos Aires, Universidad de Buenos Aires, (2009).
- [19] W. GREINER, *Quantum Mechanics*, Springer, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt, 2000.
- [20] P. R. HALMOS, *Measure Theory*, D. Van Nostrand Company, Inc., New York, N. Y., 1950.
- [21] A. N. KOLMOGOROV AND S. V. FOMIN, *Elements of the theory of functions and functional analysis. Vol. 1. Metric and normed spaces*, Graylock Press, Rochester, N. Y., 1957.
- [22] ———, *Elements of the theory of functions and functional analysis. Vol. 2: Measure. The Lebesgue integral. Hilbert space*, Graylock Press, Albany, N.Y., 1961.
- [23] E. KREYSZIG, *Introductory Functional Analysis with Applications*, Wiley, USA, 1989.
- [24] ———, *Advanced Engineering Mathematics*, Wiley, USA, 2006.
- [25] L. LANDAU, & E. LIFSHITZ, *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, Series in Theoretical Physics, Pergamon Press Ltda., 1965.
- [26] I. LÓPEZ, J. PORRO, E. MUÑOZ, AND M. ECHEVERRÍA, *Cuántica y Relatividad TOE's (Teorías del Todo)*, Universidad del País Vasco /EHU, Leioa, 2004.
- [27] R. ÁLVAREZ, *Una Introducción a la Mecánica Cuántica para “no iniciados”*, Universidad de Sevilla, 2009.
- [28] J. MAYORGA-ZAMBRANO, *Resultados Matemáticos en Mecánica Cuántica: Multiplicidad y concentración para la Ecuación de Schrödinger no-lineal con frecuencia crítica y propiedades de compacidad para operadores de traza*, Universidad de Chile, (2008).
- [29] H. MORA, *Métodos Numéricos con Scilab*, Universidad Nacional de Colombia, 2010.
- [30] Y. OH, *On positive multi-lump bound states of nonlinear Schrödinger equations under multiple well potential*, Comm. Math. Phys., 131 (1990), pp. 223–253.

- [31] M. O. ORTÍN AND M. A. SERRANO, *Física cuántica*, Universidad de Murcia, (2004).
- [32] A. QUARTERONI, R. SACCO, AND F. SALERI, *Numerical Mathematics*, Springer Berlin Heidelberg Dunod, New York, 2007.
- [33] P. RABINOWITZ, *Minimax methods in critical point theory with applications to differential equations*, vol. 65 of CBMS Regional Conference Series in Mathematics, Published for the Conference Board of the Mathematical Sciences, Washington, DC, 1986.
- [34] —, *On a class of nonlinear Schrödinger equations*, Z. Angew. Math. Phys., 43 (1992), pp. 270–291.
- [35] S. ROMERO, F. MORENO, AND I. & RODRÍGUEZ, *Introducción a las Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP's)*, Universidad de Huelva & Escuela Politécnica de Rábida, 2001.
- [36] G. SALLET, *Ordinary Differential Equations with Scilab*, University Gaston Berger, (2004).
- [37] N. SUNG HA, *A Nonlinear Shooting Method for Two-Point Boundary Value Problems*, PERGAMON Computers and Mathematics with Applications, <http://www.elsevier.nl/locate/camwa>, 42 (2000), pp. 1411–1420.
- [38] J. VILLANUEVA., *Equacions Diferencials Ordinàries*, Universitat Politècnica de Catalunya, (2009).
- [39] X. WANG, *On concentration of positive bound states of nonlinear Schrödinger equations*, Comm. Math. Phys., 153 (1993), pp. 229–244.
- [40] J. V. ZAPATEIRO AND V. O. FERNÁNDEZ, *Análisis Numérico*, Ediciones Uninorte, 2007.