

Simulación de estructuras coherentes en ecuaciones de tipo Schrödinger no lineal

I. ALONSO-MALLO¹, Á. DURÁN¹, N. REGUERA²

¹ Dpto. de Matemática Aplicada, Univ. de Valladolid. E-mails: isaías@mac.uva.es, angel@mac.uva.es.

² Dpto. de Matemáticas y Computación, Univ. Burgos. E-mail: nreguera@ubu.es.

Palabras clave: Ecuación no lineal de Schrödinger, ground states, simulación numérica

Resumen

Estudiamos métodos numéricos para simular la evolución de *ground states* en un fondo de turbulencias, modeladas por ecuaciones de tipo Schrödinger no lineal. Los métodos están orientados fundamentalmente a la búsqueda de una buena aproximación en dos sentidos: la generación de los perfiles iniciales de los *ground states*, y la simulación de parámetros de estas estructuras. En función de estas dos propiedades, se establecen comparaciones entre los métodos.

1. Descripción del modelo

Consideramos la ecuación no lineal de Schrödinger en un intervalo acotado $[0, L]$ con condiciones de contorno Dirichlet nulas dado por:

$$\left. \begin{aligned} i\Psi_t + \Psi_{xx} + f(|\Psi|^2)\Psi &= 0 \\ \Psi(0, t) = \Psi(L, t) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

donde $\Psi = \Psi(x, t) \in X = L^2(0, L)$ y f es una función real que representa el término no lineal. Suponemos también que f es atractiva o *focusing*, i.e., verifica $f(x) > 0$, $f'(x) > 0$ para $x > 0$. Un caso particular de (1) corresponde a la ecuación cúbica, con $f(x) = x$. A diferencia del problema puro de valores iniciales o con condiciones de contorno periódicas, las condiciones Dirichlet conllevan que (1) no es integrable [5]. Las únicas cantidades conservadas son el hamiltoniano

$$H(\Psi) = \frac{1}{2} \int_0^L |\Psi_x|^2 dx - \frac{1}{2} \int_0^L F(|\Psi|^2) dx, \quad (2)$$

donde $F(a) = \int_0^a f(y)dy$ y el número de partículas o norma

$$N(\Psi) = \frac{1}{2} \int_0^L |\Psi|^2 dx. \quad (3)$$

Una de las propiedades de (1) sugerida en la literatura es la formación de estructuras coherentes que persisten a lo largo del tiempo junto con pequeñas fluctuaciones aleatorias [5]. En el caso atractivo, las estructuras coherentes toman la forma de ondas solitarias localizadas espacialmente o *ground states* dadas por

$$\Psi(x, t) = \Phi(x)e^{-i\lambda t} \quad (4)$$

donde Φ es la solución del problema estacionario:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{xx} + f(|\Phi|^2)\Phi + \lambda\Phi &= 0, & 0 \leq x \leq L \\ \Phi(0) = \Phi(L) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

En términos de las cantidades (2) y (3), podemos reescribir (5) como

$$\delta H(\Phi) + \lambda \delta N(\Phi) = 0, \quad (6)$$

donde δ es la derivada variacional, de forma que Φ es un punto crítico del funcional $H + \lambda N$. De hecho, es conocido que los perfiles Φ son minimizadores del hamiltoniano sujetos a un valor dado del número de partículas [5]. Esto es, Φ es la solución del problema variacional

$$H(\Psi) \rightarrow \text{mín} \quad \text{sujeto a} \quad N(\Psi) = N_0 \quad (7)$$

El *ground state* (4) consta del perfil Φ , solución de (5), que se mueve con velocidad angular $-\lambda$. En relación con la simetría del problema dada por las rotaciones, hay que observar que cualquier giro $\Phi_\theta(x) = \Phi(x)e^{-i\theta}$, $\theta \in \mathbb{R}$, también es solución de (5). Además, partiendo de uno de estos perfiles Φ_θ se obtiene el correspondiente *ground state* aplicándole el grupo de rotaciones con giros dados por λt , $t \in \mathbb{R}$. De este modo las funciones

$$\Psi(x, t, \theta, \lambda) = \Phi_\theta(x)e^{-i\lambda t} = \Phi(x)e^{-i(\lambda t + \theta)}, \quad (8)$$

generan una familia biparamétrica de *ground states* soluciones el problema (1). El parámetro θ representa una fase, mientras que λ , la velocidad angular, es el multiplicador de Lagrange del problema de minimización (7) cuya solución es Φ .

2. Descripción de los métodos numéricos

Nuestro objetivo de mejorar el rendimiento de la aproximación numérica de *ground states* puede centrarse en dos aspectos: por un lado, la obtención de perfiles iniciales Φ y, por otro, la simulación de los parámetros λ y θ en la solución de (1). Teniendo en cuenta este objetivo, consideramos la aproximación numérica de (1) por medio del método de líneas. Esto es, consideramos separadamente la discretización espacial y la integración temporal con la idea de obtener una aproximación satisfactoria.

2.1. Discretización espacial. Elementos finitos cúbicos de Hermite

Existen varias posibilidades para la discretización espacial, pero es básico para nosotros conservar una discretización natural de los invariantes (2) y (3). Para ello tomamos $\mathcal{V} = H_0^1(0, L)$ y consideramos la formulación débil de (1): hallar $u(t) \in \mathcal{V}$ tal que

$$\left. \begin{aligned} \langle \frac{du}{dt}, w \rangle + i \langle \partial_x u, \partial_x w \rangle &= i \langle f(u), w \rangle, \forall w \in \mathcal{V}, t \geq 0 \\ u(0) &= u_0 \end{aligned} \right\}$$

Consideramos entonces un parámetro h , una familia de espacios finito-dimensionales $\mathcal{V}_h \subset H_0^1(0, L)$ que aproximan \mathcal{V} y basados en elementos finitos, $u_{0,h} \in \mathcal{V}_h$, aproximación de u_0 . Obtenemos la formulación débil semidiscreta de (1): hallar $u_h(t) \in \mathcal{V}_h$ tal que,

$$\left. \begin{aligned} \langle \frac{du_h}{dt}, w_h \rangle + i \langle \partial_x u_h, \partial_x w_h \rangle &= i \langle f(u_h), w_h \rangle, \forall w_h \in \mathcal{V}_h, t \geq 0 \\ u_h(0) &= u_{0,h} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

En este trabajo tomamos \mathcal{V}_h como el espacio de funciones polinómica cúbicas a trozos de Hermite, que son continuas y con derivada continua y verificando condiciones de contorno Dirichlet nulas. Esta elección ya ha sido considerada en [1]. Si tomamos $h = L/J > 0$ con $J \in \mathbb{N}$, $x_j = jh$ para $j = 0, \dots, J$, sean $\{\sigma_j\}_{j=1}^{J-1} \cup \{\tilde{\sigma}_j\}_{j=0}^J$ las funciones de forma que definen la base de \mathcal{V}_h . Entonces, un elemento $\Psi_h \in \mathcal{V}_h$ puede ser escrito como

$$\Psi_h(x) = \sum_{j=1}^{J-1} \Psi_j \sigma_j(x) + \sum_{j=1}^{J-1} \tilde{\Psi}_j \tilde{\sigma}_j(x) + \tilde{\Psi}_0 \tilde{\sigma}_0^2(x) + \tilde{\Psi}_J \tilde{\sigma}_J^1(x) \quad (10)$$

donde $\Psi_j = \Psi_h(x_j)$, $j = 1, \dots, J-1$, y $\tilde{\Psi}_j = \partial_x \Psi_h(x_j)$, $j = 0, \dots, J$.

La aproximación $u_h(x, t) \in \mathcal{V}_h$ a la solución $u(x, t)$ de (9), puede ser escrita como

$$u_h(x, t) = \sum_{j=1}^{J-1} u_j(t) \sigma_j(x) + \sum_{j=1}^{J-1} \tilde{u}_j(t) \tilde{\sigma}_j(x) + \tilde{u}_0(t) \tilde{\sigma}_0^2(x) + \tilde{u}_J(t) \tilde{\sigma}_J^1(x)$$

donde $u_j(t)$, $j = 1, \dots, J-1$, y $\tilde{u}_j(t)$, $j = 0, \dots, J$, son respectivamente las aproximaciones de $u(x_j, t)$, $j = 0, \dots, J$, y $\partial_x u(x_j, t)$, $j = 1, \dots, J-1$.

A partir de lo anterior, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$R_h \frac{dU}{dt} = M_h U + \phi(U) \quad (11)$$

donde $U = [\tilde{u}_0, u_1, \tilde{u}_1, u_2, \tilde{u}_2, \dots, u_{N-1}, \tilde{u}_{N-1}, \tilde{u}_N]^T$, R_h y M_h son matrices simétricas y $\phi(U)$ representa el término no lineal.

La estructura hamiltoniana es conservada en la versión semidiscreta y el hamiltoniano discreto de un elemento Ψ_h of \mathcal{V}_h está dado por

$$H(\Psi_h) = \frac{1}{2} \int_0^L |(\Psi_h)_x|^2 dx - \frac{1}{2} \int_0^L F(|(\Psi_h)|^2) dx.$$

Esto es, el hamiltoniano discreto es el hamiltoniano exacto de la función polinómica cúbica a trozos Ψ_h .

De forma similar, el número de partículas de un elemento Ψ_h of \mathcal{V}_h está dado por

$$N(\Psi_h) = \frac{1}{2} \int_0^L |\Psi_h|^2 dx$$

y es también una cantidad conservada del problema (9).

2.2. Generación de perfiles iniciales

Para generar los perfiles iniciales de los *ground states*, y debido a la discretización espacial que hemos elegido, buscamos perfiles $\Phi_h \in \mathcal{V}_h$. Para ello, dado N_0 fijo, elegimos Φ_h como la solución del problema variacional discreto

$$H(\Psi_h) \rightarrow \text{mín} \quad \text{sujeto a} \quad \psi_h \in \mathcal{V}_h, \quad N(\Psi_h) = N_0. \quad (12)$$

El problema (12) puede ser resuelto numéricamente. Para ello, consideramos (10), y escribimos $u_j = v_j + iw_j$, $j = 1, \dots, J-1$, $\tilde{u}_j = \tilde{v}_j + i\tilde{w}_j$, $j = 0, \dots, J$. Entonces

$$H(\Psi_h) = \tilde{H}(v_1, w_1, \dots, v_{J-1}, w_{J-1}, \tilde{v}_0, \tilde{w}_0, \dots, \tilde{v}_J, \tilde{w}_J) = \tilde{H}(v, w, \tilde{v}, \tilde{w}), \quad (13)$$

y, de forma similar,

$$N(\Psi_h) = \tilde{N}(v_1, w_1, \dots, v_{J-1}, w_{J-1}, \tilde{v}_0, \tilde{w}_0, \dots, \tilde{v}_J, \tilde{w}_J) = \tilde{N}(v, w, \tilde{v}, \tilde{w}). \quad (14)$$

Podemos ahora reescribir (12) como

$$\tilde{H}(v, w, \tilde{v}, \tilde{w}) \rightarrow \text{mín} \quad \text{sujeto a} \quad \tilde{N}(v, w, \tilde{v}, \tilde{w}) = N_0, \quad (15)$$

que puede ser resuelto por medio de algoritmos estándar incluidos en la librerías numéricas más usuales. Notemos que (15) tiene un gran número de variables si queremos obtener perfiles iniciales con un error de discretización espacial suficientemente pequeño.

2.3. Discretización temporal

La elección del integrador temporal está relacionada con la simulación apropiada de parámetros de estructuras coherentes para (1), particularmente de *ground states* dados por (8). Es de esperar [2] que una correcta simulación esté relacionada con la conservación, durante la integración numérica temporal, de (2) y (3), las cantidades conservadas de (1).

La discretización espacial anterior lleva a un sistema rígido de ecuaciones diferenciales ordinarias de gran dimensión (11). La integración numérica será realizada mediante un método Runge Kutta simplemente diagonalmente implícito (SDIRK). El método elegido tiene orden clásico 3 y viene dado por el tablero de Butcher

$$\begin{array}{c|cc} c & \mathcal{A} & \\ \hline & b^T & \end{array} = \begin{array}{cc|cc} \frac{3+\sqrt{3}}{6} & \frac{3+\sqrt{3}}{6} & 0 & \\ \frac{3-\sqrt{3}}{6} & \frac{-\sqrt{3}}{3} & \frac{3+\sqrt{3}}{6} & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \end{array} \quad (16)$$

Este método es conveniente para resolver numéricamente (11) porque la matriz \mathcal{A} es triangular inferior y los dos elementos diagonales son iguales, lo cual lleva a una considerable ganancia computacional cuando se resuelven los sistemas implícitos para las etapas intermedias en cada paso de integración temporal

Además, todo el semiplano complejo izquierdo está incluido en su región de estabilidad absoluta. Esta propiedad, que requiere el carácter implícito del método, es definida normalmente como A -estabilidad y es necesaria debido a que la conservación de las cantidades implica que los autovalores imaginarios puros del operador lineal semidiscreto deben estar incluidos en la región de estabilidad.

Sin embargo, el uso de (16) sufre de algunos defectos serios para nosotros. El método obtiene una solución numérica no conservativa que es inapropiada para grandes escalas de tiempo. Esto puede evitarse combinando el método SDIRK con proyecciones sobre las variedades definidas por la conservación de las cantidades (2) y (3). De esta manera, podemos realizar la integración numérica temporal conservando uno o ambos invariantes.

Sean H_0 y N_0 constantes dadas y consideramos las variedades de \mathcal{V}_h :

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_1 &= \{\Psi \in H_0^1 : H(\Psi) = H_0\} \\ \mathcal{M}_2 &= \{\Psi \in H_0^1 : N(\Psi) = N_0\} \\ \mathcal{M}_3 &= \{\Psi \in H_0^1 : H(\Psi) = H_0, N(\Psi_h) = N_0\} = \mathcal{M}_1 \cap \mathcal{M}_2\end{aligned}$$

Tomando $H_0 = H(u_0)$ and $N_0 = N(u_0)$, la solución exacta de (9) verifica $u(t) \in \mathcal{M}_i$, $i = 1, 2, 3$. Nuestra idea es proyectar sobre estas variedades para asegurar que la aproximación numérica conserva una o ambas cantidades invariantes. Para ello usaremos el siguiente algoritmo: suponemos que, para algún $i = 1, 2, 3$, $U_n \in \mathcal{M}_{h,i} = \mathcal{M}_i \cap \mathcal{V}_h$. La obtención de la siguiente aproximación U_{n+1} se lleva a cabo de la siguiente manera [4]:

1. calcular \bar{U}_{n+1} por medio del método SDIRK (16),
2. proyectar el valor \bar{U}_{n+1} sobre $\mathcal{M}_{h,i}$ para obtener $U_{n+1} \in \mathcal{M}_{h,i}$.

El cálculo de U_{n+1} lleva a la solución de un problema de minimización restringido. Por ejemplo, si queremos conservar el hamiltoniano, tenemos que resolver

$$\|\bar{U}_{n+1} - U_{n+1}\| \rightarrow \text{mín} \quad \text{sujeto a} \quad \tilde{H}(U_{n+1}),$$

donde $\tilde{H}(U)$ está dado en (13). Para su solución, consideramos la función lagrangiana

$$L(U_{n+1}, \lambda) = \|\bar{U}_{n+1} - U_{n+1}\|^2/2 - \tilde{H}(U_{n+1})^T \lambda$$

donde el número de multiplicadores de Lagrange es igual al de cantidades que conservamos. A partir de la condición necesaria $\partial L / \partial U_{n+1} = 0$, y sustituyendo \tilde{U}_{n+1} por U_{n+1} , obtenemos el sistema

$$\left. \begin{aligned} U_{n+1} &= U_{n+1} + \tilde{H}'(U_{n+1})^T \lambda \\ 0 &= \tilde{H}(U_{n+1}) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

que puede ser resuelto eficientemente para λ por medio de un procedimiento iterativo. Nótese que el sistema en (17) es de dimensión 1 ó 2 y por tanto el costo computacional de su solución es despreciable frente a la solución de las etapas del método SDIRK.

3. Experimentos numéricos

Mostramos en esta sección los experimentos numéricos realizados con los métodos explicados previamente. Todos se realizan para (1) con $f(x) = x$, es decir la ecuación cúbica de Schrödinger. Este caso, de indudable importancia, tiene además otra propiedad destacable relacionada con nuestra discretización. Tras discretizar en espacio, la expresión

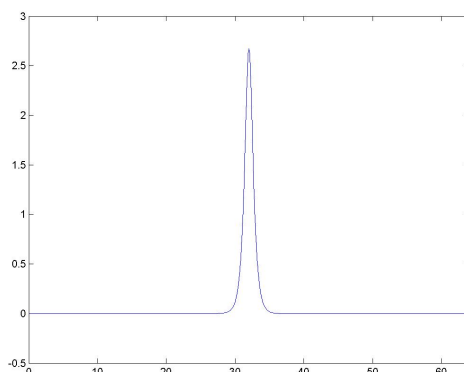


Figura 1: Ground state en $[0, 64]$ discretizado en espacio con $J = 2400$ subintervalos.

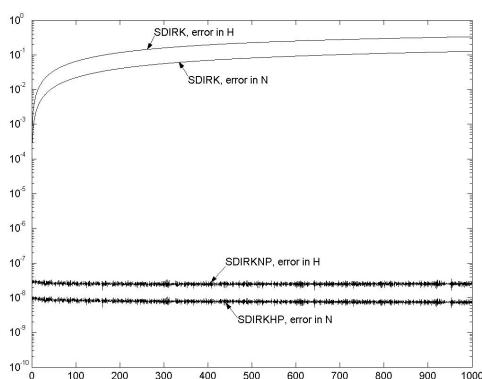


Figura 2: Evolución en tiempo del error en las cantidades H y N en escala logarítmica.

exacta del término no lineal que aparece en (11) es, si bien bastante complicada, suficientemente sencilla como para ser obtenida mediante cálculo simbólico. Esto es relevante pues evita el uso de técnicas de cuadratura numérica que serían necesarios para otro tipo de no linealidades y permite obtener resultados mucho más precisos en los experimentos.

Nos centraremos en la simulación de la evolución temporal de *ground states*, mientras que el efecto de las perturbaciones será objeto de un estudio posterior.

Empezamos considerando, como condición inicial, el perfil inicial del *ground state* simétrico en el intervalo $[0, 64]$ mostrado en la figura 1. Este perfil ha sido obtenido con la versión 19 de la librería NAG, tomando $J = 2400$ y buscando entonces un polinomio cúbico de Hermite a trozos cuyos coeficientes fueran solución del problema de optimización (15). La rutina de optimización usada devuelve una primera aproximación al parámetro λ asociado a la velocidad angular a través de la última aproximación disponible del multiplicador de Lagrange, que en este caso resulta ser $\lambda \approx -3.5513497$. Además el número de partículas es $N = 3.78125$.

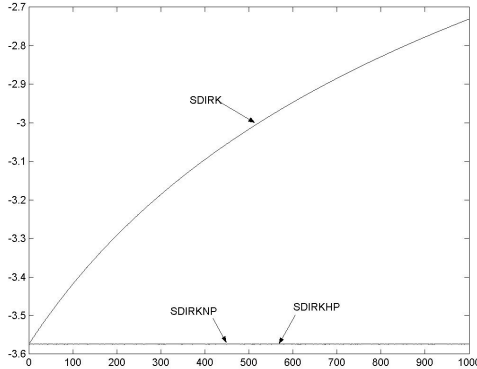


Figura 3: Evolución de λ frente al tiempo para los 3 métodos.

La discretización espacial se realiza entonces como se explicó en la Sección 2.1. Para la integración en tiempo hay que notar que no podemos usar el método SDIRK combinado con la proyección sobre la variedad definida por la conservación de ambos invariantes debido a la relación (6) entre sus derivadas variacionales. En la práctica esto no resulta excesivamente importante pues la proyección para conservar un invariante lleva en este caso a un también excelente comportamiento en la otra cantidad.

Usamos entonces el método SDIRK dado por (16), el mismo método pero combinado con una proyección para conservar el número de partículas (SDIRKNP) y con una proyección para conservar el hamiltoniano (SDIRKH). La figura 2 muestra el error, con longitud de paso en tiempo $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ y hasta tiempo $t = 1000$, de la evolución de los invariantes para cada uno de los tres métodos. El peor comportamiento corresponde al método SDIRK sin proyecciones, para el cual se ve un error mucho mayor junto con un crecimiento evidente cuando progresa la computación. En cuanto a cada uno de los algoritmos con proyección, se ha dibujado únicamente el error en la cantidad sobre la que no se ha proyectado pues para ésta el error es del tamaño del error de redondeo, en este caso precisión doble. Nótese que los errores medidos son realmente pequeños, del orden de 10^{-8} , siendo además básicamente constantes al incrementarse el tiempo.

Este comportamiento de los métodos con respecto a las cantidades invariantes N y H tiene una clara influencia en la simulación de la velocidad angular $-\lambda$ del *ground state*. Hemos aproximado numéricamente este parámetro teniendo en cuenta que

$$\frac{u_{j,n-1}}{u_{j,n}} \approx \frac{\phi(x_j) \exp(-i\lambda t_{n-1})}{\phi(x_j) \exp(-i\lambda t_n)} = \exp(i\lambda k)$$

entonces,

$$\lambda \approx \frac{\arg\left(\frac{u_{j,n-1}}{u_{j,n}}\right)}{k}.$$

La calidad de la aproximación obtenida depende en la práctica del punto x_j elegido, siendo en este caso óptimo el punto $x_j = 32$, donde se alcanza el máximo del perfil inicial.

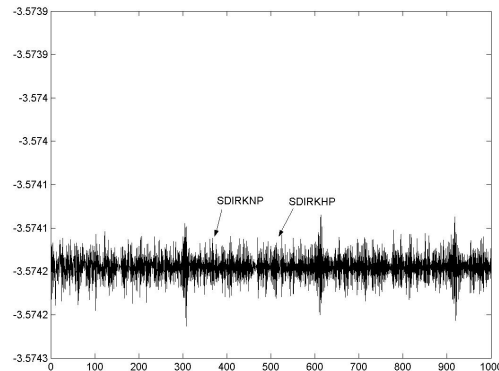


Figura 4: Evolución de λ frente al tiempo para los 2 métodos con proyección.

La evolución de λ para el *ground state* del experimento anterior es mostrado en las figuras 3 y 4. En la figura 3 observamos que es evidente el crecimiento temporal de la aproximación del parámetro λ para el método SDIRK. Por su parte, los métodos SDIRKN y SDIRKH muestran una evolución casi constante. Tal como indica la figura 4, la aproximación a λ dada por ambos métodos es muy similar e incorpora un ruido de pequeña amplitud que no afecta a la evolución constante del parámetro.

Agradecimientos

El primer y tercer autores de este trabajo han sido financiados por el proyecto MTM 2007-66343 cofinanciado por fondos FEDER y por el proyecto de la Junta de Castilla y León JCyL VA040A07. El segundo autor ha sido financiado por el proyecto de la Junta de Castilla y León JCyL VA001A08.

Referencias

- [1] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *A high order finite element discretization with local absorbing boundary conditions of the linear Schrödinger equation*, J. Comput. Phys. 220 (2006), no. 1, 409–421.
- [2] Á. Durán, J.M. Sanz-Serna, *The numerical integration of relative equilibrium solutions*, IMA J. Numer. Anal. 20 (2000), 235–261.
- [3] A. Eisner, B. Turkington, *Nonequilibrium statistical behavior of nonlinear Schrödinger equations*. Physica D, 213 (2006), 85-97.
- [4] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric numerical integration. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Second edition.*, Springer-Verlag, Berlin, 2006. 1983.
- [5] R. Jordan, B. Turkington, C. L. Zirbe, *A mean-field statistical theory for the nonlinear Schrödinger equation*. Physica D, 137 (2000), 353-378.