



Universidad de Valladolid

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

TESIS DOCTORAL:

**INTEGRACIÓN NUMÉRICA EXPONENCIAL
DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER NO LINEAL**

Presentada por Adolfo González Pachón para optar al
grado de doctor por la Universidad de Valladolid

Dirigida por:
Begoña Cano Urdiales

Agradecimientos.

Este trabajo de Tesis llevado a cabo en el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Valladolid no hubiese sido posible sin la participación de los profesores del Programa de Doctorado de Matemáticas y, por supuesto, gracias a mi Directora de Tesis, Begoña Cano Urdiales, por haberme confiado este trabajo en persona, por su gran capacidad profesional, por su paciencia mostrada en todo momento y por su enorme calidad humana.

Este trabajo también requiere un especial agradecimiento a mi familia: mi mujer María Antonia y mis hijas, Laura y Claudia, que, de forma incondicional, entendieron mis ausencias.

Las palabras nunca serán suficientes para mostrar todo mi aprecio y agradecimiento.

A todos, mi mayor reconocimiento y gratitud.

Presentación.

La memoria que se presenta para optar al título de Doctor tiene por objeto el estudio de integradores exponenciales para la ecuación de Schrödinger no lineal.

Es bien conocida la aplicación de dicha ecuación en distintos ámbitos de la Ciencia y la Tecnología pero no resulta fácil obtener soluciones analíticas incluso ante problemas sencillos de valores iniciales. Ante esta situación resulta necesario tener que acudir a técnicas numéricas para su resolución.

Partiendo de una discretización pseudoespectral que se sabe muy precisa para soluciones suficientemente regulares, nos centraremos básicamente en la integración temporal de la mencionada ecuación.

Los métodos exponenciales se caracterizan por integrar la parte lineal del sistema de forma exacta. Por ello son en general muy adecuados para integrar sistemas donde la parte rígida es lineal como ocurre al discretizar la ecuación de Schrödinger. Esto es debido a que se pueden conseguir métodos explícitos y linealmente estables a la vez, lo cual es imposible dentro del grupo de métodos clásicos.

Asimismo es bien sabido que la ecuación de Schrödinger tiene una estructura hamiltoniana y una serie de invariantes, algunos de ellos, con un importante significado físico. Existen métodos clásicos geométricos (simpléticos y/o simétricos) que, como es bien conocido, son adecuados para la integración a tiempos largos. Obtener simplecticidad en un método exponencial no es tarea fácil y, desafortunadamente, los métodos exponenciales de tipo Runge-Kutta simétricos son necesariamente implícitos por lo cual hemos decidido considerar métodos exponenciales explícitos de tipo Runge-Kutta Lawson proyectados sobre el invariante más sencillo que existe; la norma, observando que, bajo ciertas condiciones también se obtiene la conservación de otro invariante, el momento lineal.

Por otro lado, cuando se descompone la ecuación de Schrödinger no lineal en dos partes, se sabe integrar cada una de ellas de modo exacto mediante un método de splitting que puede ser simétrico y que es también exponencial explícito y linealmente estable. Para la ecuación de Schrödinger no lineal este

tipo de métodos también conservan la norma y el momento y nos planteamos compararlos con los métodos exponenciales y explícitos de Lawson proyectados anteriormente citados.

El trabajo se estructura como sigue. En el capítulo 0 se dan unos preliminares sobre la ecuación de Schrödinger, la discretización pseudoespectral y los integradores exponenciales. En el capítulo 1 se estudian diferentes métodos exponenciales de tipo Runge-Kutta de orden 2, implícitos y explícitos, se analizan los errores en los diferentes invariantes y se compara con el método clásico conocido como regla de punto medio al integrar soluciones de tipo onda solitaria de la ecuación cúbica de Schrödinger. En el capítulo 2 se corrobora teóricamente las consecuencias que tiene, para ciertas condiciones iniciales y ecuaciones más generales que la cúbica, proyectar sobre el invariante de la norma al integrar con métodos explícitos de Lawson. También se ofrece una comparativa para métodos de diferentes órdenes con los métodos de splitting, tanto para una integración con paso fijo como con paso variable. Por último, en el capítulo 3, se realiza un estudio detallado del comportamiento de ciertos integradores exponenciales con respecto a la estabilidad al integrar unas soluciones de la ecuación cúbica denominadas ondas planas. Nos centraremos en un método de splitting de segundo orden y un conjunto de métodos explícitos de Lawson del mismo orden, antes y después de proyectar sobre la norma.

Queremos destacar aquí que, aunque en el capítulo 1, el análisis en principio se hace sobre el sistema pseudodiscretizado en espacio, suponemos que cuando el número de nodos crece la solución de este sistema aproxima los valores de la solución del problema original sin discretizar. En los capítulos 2 y 3, el análisis se hace directamente en el problema continuo, sin discretizar en espacio, aunque los resultados numéricos obviamente sí utilicen dicha discretización.

Las conclusiones de los capítulos 1 y 2 aparecen en un apartado con ese nombre al final de los capítulos y las del capítulo 3 en la correspondiente introducción.

INTEGRACIÓN NUMÉRICA EXPONENCIAL DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER NO LINEAL

Adolfo González Pachón
Directora: Begoña Cano Urdiales

Diciembre de 2014

Contenidos

0	Preliminares.	4
0.1	Ecuaciones de Schrödinger. Invariantes.	4
0.2	Discretización pseudoespectral en el espacio de frecuencias. . .	7
0.3	Integradores exponenciales.	10
0.3.1	Tipo Runge-Kutta.	11
0.3.2	Tipo Splitting.	13
1	Integración Exponencial de Ondas Solitarias de la Ecuación Cúbica de Schrödinger.	16
1.1	Introducción.	16
1.2	Preliminares.	18
1.3	Validez del desarrollo asintótico del error para los métodos exponenciales y su utilización para probar órdenes más altos de precisión de las cantidades conservadas.	22
1.4	Comparación de métodos implícitos geométricos.	25
1.4.1	Error en $I_{1,N}$ para CEMR.	27
1.4.2	Error en $I_{2,N}$ para CEMR	30
1.4.3	Errores en $I_{1,N}$ y $I_{2,N}$ para CEMROP y CEMRSP. . .	34

1.4.4	Implementación y resultados numéricos.	37
1.5	Métodos explícitos de Lawson.	41
1.5.1	Resultados numéricos.	46
1.6	Conclusión.	47
2	Proyección de Métodos Lawson Explícitos.	60
2.1	Introducción.	60
2.2	Preliminares.	62
2.3	Proyección ortogonal sobre la norma.	63
2.4	Comprobación numérica.	69
2.5	Comparación numérica con métodos de splitting.	75
2.5.1	Ondas Solitarias.	77
2.5.2	Otras soluciones que requieren una implementación adaptativa.	80
2.6	Conclusión.	85
3	Estabilidad integrando ondas planas.	99
3.1	Introducción.	99
3.2	Preliminares.	101
3.2.1	Problema Continuo.	101
3.2.2	Descripción de los métodos.	103
3.3	Resultados teóricos.	104
3.3.1	Comportamiento de los distintos métodos cuando se integra la onda plana.	104
3.3.2	Comportamiento de los diferentes métodos cuando se integra una onda plana perturbada.	105

3.4	Regiones de estabilidad.	111
3.5	Evitando inestabilidades.	112
3.6	Apéndice A. Prueba del Teorema 3.3.1.	116
3.7	Apéndice B. Prueba del Teorema 3.3.4.	118
3.8	Apéndice C. Prueba del Teorema 3.3.6.	121

Capítulo 0

Preliminares.

0.1 Ecuaciones de Schrödinger. Invariantes.

Es un hecho ampliamente conocido que las ecuaciones de la física no pueden ser derivadas sino deducidas. Este es el caso también de las ecuaciones de Schrödinger y, en particular, de sus versiones no lineales [10]. De una manera genérica las anteriores pueden ser escritas en la forma

$$iu_t(\mathbf{x}, t) = -\mu\Delta u(\mathbf{x}, t) + f(u^*(\mathbf{x}, t)u(\mathbf{x}, t), \mathbf{x})u(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

donde μ es una constante positiva y f es una función de la densidad y las coordenadas $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. El hecho relevante de la deducción de las ecuaciones de Schrödinger no lineales es que puede llevarse a cabo sin las suposiciones probabilísticas de la Mecánica Cuántica. Se trata de un vínculo existente entre la Teoría Clásica de Campos y la Mecánica Clásica con la Mecánica Cuántica. Supondremos que la ecuación buscada procede de un Hamiltoniano de Evolución Complejo dado por

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta u^*},$$

con H el funcional $\int_{R^d} \mathcal{H}(u, u^*, \partial u, \partial u^*) d\mathbf{x}$, $\partial u = (\partial u / \partial x_1, \dots, \partial u / \partial x_d)$ y

$$\frac{\delta H}{\delta u^*} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u^*} - \sum_{j=1}^d \frac{d}{dx_j} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_j u^*)}$$

es la derivada variacional de H con respecto a u^* . Utilizando diferentes densidades \mathcal{H} se obtienen diferentes ecuaciones de Schrödinger no lineales válidas para distintos fenómenos físicos presentes en la naturaleza. Una de las posibles ecuaciones es a la que conduce la densidad hamiltoniana dada por $\mathcal{H} = |u_x|^2 - (1/2)|u|^4$ y que se denomina ecuación cúbica de Schrödinger, lógicamente no lineal, y que viene dada en una dimensión por

$$iu_t(x, t) + u_{xx}(x, t) + |u(x, t)|^2 u(x, t) = 0. \quad (2)$$

Al igual que en el caso de hamiltonianos discretos los problemas diferenciales asociados a funcionales hamiltonianos también poseen invariantes; siendo éstos, en general, un número infinito. En el caso de la ecuación cúbica de Schrödinger con condiciones de frontera periódicas o en el problema puro de valores iniciales éste es el caso. Nos limitamos a mencionar tres cuya relevancia es, además de matemática, física,

$$I_1 = -\frac{1}{2} \int_a^b |u|^2 dx, \quad (3)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_a^b \text{Im}(u^* u_x) dx, \quad (4)$$

$$H = \frac{1}{2} \int_a^b (|u_x|^2 - \frac{1}{2}|u|^4) dx, \quad (5)$$

siendo (a, b) el intervalo espacial donde se imponen condiciones de frontera periódicas ó $(-\infty, \infty)$ en el problema de los valores iniciales [10, 25]. Es obvio que cualquier invariante multiplicado por una constante lo sigue siendo. Los invariantes presentados anteriormente poseen unos coeficientes aceptados así en la literatura al respecto.

Las ecuaciones de Schrödinger no lineales presentan, en general, una gran dificultad en su resolución, estando la mayoría de resultados destinados a tratar con propiedades cualitativas de su solución, dejando los aspectos cuantitativos de las soluciones en el terreno del Análisis Numérico. Es de sobra

conocida la importancia de los métodos Runge-Kutta como integradores temporales de algunos problemas de la física matemática; entre otros, la ecuación de Schrödinger no lineal. Algunos trabajos recientes [12] abordan la conservación de invariantes cuando se integra adecuadamente en tiempo y espacio la ecuación de ondas no lineal y la ecuación de Schrödinger no lineal. Como integradores temporales para esta última se han considerado métodos Runge-Kutta simplécticos a la vez que se plantea el interés de ver cómo responden otros tipos de integradores temporales geométricos. En este sentido, existen otros métodos de auge reciente en la literatura para problemas parabólicos denominados métodos exponenciales porque integran exactamente la parte lineal del problema. Para este tipo de problemas, dichos métodos resultan muy interesantes, pues se pueden obtener métodos a la vez explícitos y estables.

0.2 Discretización pseudoespectral en el espacio de frecuencias.

Existen varios tipos de estrategias para abordar el problema de la ecuación de Schrödinger no lineal. Por simplicidad, nos centraremos aquí en el caso unidimensional y la ecuación cúbica de Schrödinger, aunque los resultados son generalizables a varias dimensiones y otros funcionales hamiltonianos. Así por ejemplo, en algunas ocasiones, se utiliza discretización espacial de segundo y cuarto orden para el término u_{xx} . El problema que surge de este modo es un sistema semidiscreto ampliamente tratado en la literatura [34]. Para la resolución numérica del problema nosotros usaremos el método de líneas. Plantearemos el problema como periódico aún en el caso de problema de valor inicial y adoptaremos para $u(x, t)$ una representación pseudoespectral que tenga en cuenta las condiciones de periodicidad que ha de poseer la solución y posteriormente un método numérico para el tiempo. Asumiremos entonces que podemos aproximar $u(x, t)$ por una expresión trigonométrica del tipo

$$T_M(x, t) = \sum_{k=-M}^{M-1} c_{N,k}(t) e^{2\pi i k \frac{x-a}{b-a}} \quad (6)$$

donde $N = 2M$. Parece asumible en principio que, las aproximaciones de los términos $u_t(x, t)$ y $u_{xx}(x, t)$ sean las obtenidas derivando adecuadamente la expresión dada para $T_M(x, t)$. Para la parte no lineal sustituiremos $|u(x, t)|^2 u(x, t)$ por el interpolante trigonométrico de $|T_M(x, t)|^2 T_M(x, t)$ que en realidad es el suyo propio. Podemos, por tanto, escribir para este último caso

$$\sum_{k=-M}^{M-1} r_{N,k}(c_N(t)) e^{2\pi i k \frac{x-a}{b-a}}$$

donde $c_N(t) = (c_{N,-M}(t), \dots, c_{N,M-1}(t))^T$ y

$$r_N(c_N(t)) = \frac{1}{N} S_N F_N \tilde{r}_N (N F_N^{-1} S_N c_N(t)),$$

siendo F_N la transformada discreta de Fourier de orden N , S_N la transformación que a cada vector de la forma $(v_{-M}, \dots, v_{-1}, v_0, \dots, v_{M-1})$ lo lleva en el vector $(v_0, \dots, v_{M-1}, v_{-M}, \dots, v_{-1})$ y \tilde{r}_N la aplicación definida por

$(\tilde{r}_N(v))_i = |v_i|^2 v_i$, $i = 1, \dots, N$. Con estas consideraciones realizadas, sustituyendo las citadas expresiones en el problema original se obtiene la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} c_{N,-M} \\ \vdots \\ c_{N,M-1} \end{bmatrix}_t + i \left(\frac{2\pi}{b-a} \right)^2 \begin{bmatrix} (-M)^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (-M+1)^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (M-1)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{N,-M} \\ \vdots \\ c_{N,M-1} \end{bmatrix} \\ = ir_N \left(\begin{bmatrix} c_{N,-M} \\ \vdots \\ c_{N,M-1} \end{bmatrix} \right), \end{aligned}$$

que en una forma más compacta puede escribirse del modo

$$c_{N,t} + iD_N c_N = ir_N(c_N), \quad (7)$$

donde

$$D_N = \left(\frac{2\pi}{b-a} \right)^2 \begin{bmatrix} (-M)^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (-M+1)^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (M-1)^2 \end{bmatrix}, \quad c_N = \begin{bmatrix} c_{N,-M} \\ \vdots \\ c_{N,M-1} \end{bmatrix}.$$

Al igual que se ha discretizado la ecuación de Schrödinger no lineal de tipo cúbico unidimensional, se pueden dar expresiones análogas para los invariantes continuos anteriormente citados. Teniendo en cuenta que $u(x, t)$ lo podemos aproximar por T_M en (6), podemos aproximar el correspondiente invariante I_1 en (3) por

$$I_{1,N} = -\frac{1}{2} \int_a^b |T_M|^2 dx.$$

Dado que si $k \in Z \setminus \{0\}$, $\int_a^b e^{2\pi i k \frac{x-a}{b-a}} dx = 0$, se tiene

$$I_{1,N} = -\frac{1}{2}(b-a) \sum_{k=-M}^{M-1} |c_k(t)|^2. \quad (8)$$

Para I_2 , dado por (4), teniendo en cuenta que

$$\text{Im}(u^* u_x) = \frac{1}{2i} \left(u^* \frac{du}{dx} - u \frac{du^*}{dx} \right)$$

y la aproximación dada para $u(x, t)$ por T_M en (6), se obtiene como aproximación para I_2 en (4)

$$I_{2,N} = \frac{1}{4i} \int_a^b \left(T_M^* \frac{dT_M}{dx} - T_M \frac{dT_M^*}{dx} \right) dx = \pi \sum_{k=-M}^{M-1} k |c_k(t)|^2. \quad (9)$$

Podemos escribir el sistema (7) en el espacio físico en vez de en el de las frecuencias $c(t)$ sin más que utilizar la transformación $c = \frac{1}{N} S F_N U$ obteniendo

$$U_{N,t} - i A_N U_N = i \tilde{r}_N(U_N), \quad (10)$$

donde

$$A_N = -F_N^{-1} S_N D_N S_N F_N \quad (11)$$

es la discretización pseudoespectral de la derivada segunda. Escribiendo en (10) U como $V + iW$ y descomponiendo A_N como $\text{Re}A_N + i\text{Im}A_N$ obtenemos, después de separar las partes real e imaginaria, el siguiente sistema

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} V_{N,1} \\ \vdots \\ V_{N,N} \end{bmatrix}_t + \text{Im}A_N \begin{bmatrix} V_1 \\ \vdots \\ V_{N,1} \end{bmatrix} + \text{Re}A_N \begin{bmatrix} W_{N,1} \\ \vdots \\ W_{N,N} \end{bmatrix} &= -\text{Im}\tilde{r}_N, \\ \begin{bmatrix} W_{1,N} \\ \vdots \\ W_{N,N} \end{bmatrix}_t - \text{Re}A_N \begin{bmatrix} V_{1,N} \\ \vdots \\ V_{N,N} \end{bmatrix} + \text{Im}A_N \begin{bmatrix} W_{1,N} \\ \vdots \\ W_{N,N} \end{bmatrix} &= \text{Re}\tilde{r}_N. \end{aligned}$$

Puede comprobarse [25] que la matriz A_N anteriormente dada en (11) es una matriz real y simétrica. De hecho,

$$(A_N)_{lr} = -\frac{4\pi^2}{(b-a)^2 N} \left[(-1)^{r-l} \frac{N^2}{4} + 2 \sum_{j=1}^{N/2-1} j^2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}(r-l)j\right) \right].$$

Con ello las expresiones anteriores se pueden escribir de un modo más compacto utilizando para ello una notación matricial

$$\begin{bmatrix} V_N \\ W_N \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} O & A_N \\ -A_N & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_N \\ W_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\text{Im}\tilde{r}_N \\ \text{Re}\tilde{r}_N \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Por otra parte las ecuaciones (12) pueden ser deducidas de un problema hamiltoniano en N dimensiones si consideramos como función de Hamilton a $NH_N/(b-a)$ con

$$H_N(V_N^T, W_N^T) = \frac{a-b}{2N} \left(V_N^T A_N V_N + W_N^T A_N W_N + \frac{\langle (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2), \mathbf{1}_N \rangle}{2} \right) \quad (13)$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto interno estandar, \cdot el producto componente a componente y $\mathbf{1}$ el vector formado por unos de tamaño N . La función de Hamilton (13) es, además, la versión pseudodiscretizada en el espacio (V_N, W_N) del hamiltoniano dado por (5) [12]. De acuerdo con la Teoría de Hamilton la función H_N , independiente del tiempo, se conserva con éste. Por otro lado, los invariantes $I_{1,N}$ e $I_{2,N}$ dados por (8) y (9) respectivamente, pueden escribirse en el espacio físico como [12]

$$I_{1,N} = -\frac{1}{2} \frac{b-a}{N} U^* U \quad (14)$$

$$I_{2,N} = \frac{1}{4i} \frac{b-a}{N} (U^* B_N U - U^* B_N^* U) \quad (15)$$

con B_N la matriz correspondiente a la discretización pseudoespectral de la derivada primera a través del interpolante trigonométrico simétrico. Puede demostrarse [12] que $I_{1,N}$ también es un invariante de (13). Si bien $I_{2,N}$ no es un invariante exacto para H_N , sí puede considerarse un cuasinvariante [12].

0.3 Integradores exponenciales.

Muchos problemas de la física y en general de la matemática aplicada se reducen a resolver ecuaciones del tipo

$$\begin{aligned} u_t(t) &= Lu(t) + g(t, u(t)), \\ u(t_0) &= u_0. \end{aligned} \quad (16)$$

donde L es un operador lineal y el origen de la rigidez del problema. Por otro lado g representa las fuentes y es causa de la no linealidad del problema en general. Un integrador se dice exponencial si se trata de un método numérico que es exacto cuando $g \equiv 0$. Problemas como el mencionado son los que surgen cuando se pseudodiscretiza en espacio una ecuación de ondas; y en

particular, la ecuación cúbica de Schrödinger (2) obteniéndose (7). Existe un amplio abanico de métodos exponenciales en la literatura. Exponemos a continuación algunos de los más relevantes y útiles en nuestro trabajo.

0.3.1 Tipo Runge-Kutta.

Los métodos Runge-Kutta exponenciales planteados en su forma más general adoptan la siguiente forma que en principio y formalmente recuerdan a los métodos Runge-Kutta clásicos; y, como más adelante se pondrá de manifiesto tienen una conexión con éstos en lo que se suele llamar el método Runge-Kutta subyacente. Un método Runge-Kutta exponencial de s etapas, para un problema como el descrito en (16) adopta la forma [40]

$$U_{n+1} = e^{hL}U_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hL)g(t_n + c_i h, K_i), \quad (17)$$

$$K_i = \chi_i(hL)U_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(hL)g(t_n + c_i h, K_j). \quad (18)$$

donde U_n son las estimaciones del vector $u(t)$ en $t_0 + nh, n = 0, 1, 2, \dots$; y $K_i, i = 1, 2, \dots, s$, son las etapas del método. Las funciones $\chi_i(z)$, $b_i(z)$ y $a_{ij}(z)$ con $i, j = 1, \dots, s$ son funciones analíticas o en caso de tener alguna singularidad ésta es evitable. Este método resuelve el problema exactamente cuando $g \equiv 0$ a diferencia de lo que ocurre generalmente con los métodos Runge-Kutta clásicos. Estos métodos pueden ser simétricos si se satisfacen ciertas condiciones independientemente obtenidas en [16, 25] y que son

$$c_i = 1 - c_{s+1-i}, \quad (19)$$

$$\chi_i(-z) = \chi_{s+1-i}(z)e^{-z}, \quad (20)$$

$$b_i(-z) = e^{-z}b_{s+1-i}(z), \quad (21)$$

$$a_{ij}(-z) = \chi_{s+1-i}(z)e^{-z}b_{s+1-j}(z) - a_{s+1-i, s+1-j}(z), \quad (22)$$

con $i = 1, \dots, s$ y $j = 1, \dots, s$.

Tipo Runge-Kutta Lawson.

Hasta donde conocemos, los métodos de tipo Lawson fueron los primeros de tipo exponencial introducidos en la literatura, más concretamente por

Lawson en 1967 [37]. Se dedujeron llevando a cabo el cambio de variable $z(t) = e^{-tL}u(t)$ en (16), lo cual convierte el problema en uno no rígido que se resuelve a partir de un esquema Runge-Kutta standard definido por el tablero

$$\begin{array}{c|ccc}
 c_1 & \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1s} \\
 \vdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
 c_s & \alpha_{s1} & \cdots & \alpha_{ss} \\
 \hline
 & \beta_1 & \cdots & \beta_s \quad .
 \end{array} \tag{23}$$

Deshaciendo el cambio de variable aparece el denominado método de Lawson, que es de la forma (17)-(18) con

$$\chi_i(z) = e^{c_i z}, \tag{24}$$

$$a_{ij}(z) = \alpha_{ij} e^{(c_i - c_j)z}, \tag{25}$$

$$b_i(z) = \beta_i e^{(1 - c_i)z}. \tag{26}$$

Puede demostrarse fácilmente que las condiciones de simetría (19)-(20)-(21)-(22) particularizadas a estos métodos equivalen a las condiciones de simetría del método Runge-Kutta subyacente. Más concretamente,

$$c_{s+1-r} = 1 - c_r, \quad \beta_{s+1-r} = \beta_r, \quad \beta_j = \alpha_{r,j} + \alpha_{s+1-r,s+1-j}, \quad r, j = 1, \dots, s.$$

Tipo Runge-Kutta Gauss o de colocación.

A veces, un método Runge-Kutta exponencial como los planteados anteriormente procede o puede ser deducido formalmente a partir de la idea de los métodos de Gauss o de colocación. Para deducir la expresión del integrador numérico a partir de puntos de colocación c_i , escribimos g en la fórmula de variación de las constantes obteniendo

$$u(t_n + h) = e^{hL}u(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)L}g(t_n + \tau, u(t_n + \tau)) d\tau.$$

Al igual que se hace en los métodos Runge-Kutta clásicos, se sustituye el término g por un polinomio de colocación \tilde{g} en los puntos c_i , $i = 1 \dots s$, (distintos dos a dos) de modo que obtenemos la expresión

$$u(t_n + h) \simeq e^{hL}u(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)L}\tilde{g}_n(\tau) d\tau.$$

Haciendo $U_n \simeq u(t_n)$ y $U_{n,i} \simeq u(t_n + c_i h)$, podemos entonces definir el polinomio de colocación como aquel de grado $s - 1$ que verifica las condiciones $\tilde{g}_n(c_i h) = g(t_n + c_i h, U_{n,i}) = G_{n,i}$, $i = 1, \dots, s$, de modo que tendremos

$$\tilde{g}_n(\tau) = \sum_{j=1}^s l_j(\tau) G_{n,j},$$

donde cada l_j denota el polinomio de interpolación de Lagrange dado por

$$l_j(\tau) = \prod_{m \neq j} \frac{\tau/h - c_m}{c_j - c_m}.$$

El método de colocación queda por tanto descrito de la siguiente manera

$$U_{n+1} = e^{hL} U_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hL) G_{n,i},$$

y para las etapas,

$$U_{n,i} = e^{c_i h L} U_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij}(hL) G_{n,j},$$

donde los términos $b_i(hL)$ y $a_{ij}(hL)$ vienen dados por

$$b_i(hL) = \frac{1}{h} \int_0^h e^{(h-\tau)L} l_i(\tau) d\tau, \quad (27)$$

$$a_{ij}(hL) = \frac{1}{h} \int_0^{c_i h} e^{(c_i h - \tau)L} l_j(\tau) d\tau. \quad (28)$$

En [25] hemos visto que las condiciones de simetría (19)-(20)-(21)-(22) particularizadas a los métodos Runge-Kutta exponenciales de colocación se reducen a que los coeficientes c_i sean simétricos; es decir, $c_{s+1-i} = 1 - c_i$, $i = 1, \dots, s$.

0.3.2 Tipo Splitting.

La idea que subyace en los *Métodos de Splitting* es completamente diferente a lo visto anteriormente para estos métodos. Si atendemos a un problema

como el descrito en (2) observamos que la parte que no depende de u_t se puede separar en dos sumandos; en nuestro caso, las partes lineal y no lineal del problema. El procedimiento es separar (splitting) el problema de la integración en dos, uno para cada sumando, a la espera de que, cada problema por separado, sea más fácil de integrar y dar como solución la composición de las respectivas soluciones o aproximaciones a las mismas. En nuestro problema concreto dado por (2) el método de splitting se traduce en integrar separadamente

$$u_t = iu_{xx}, \quad (29)$$

y

$$u_t = i|u|^2u. \quad (30)$$

Llegados a este punto puede ser que uno y/o los dos problemas dados por (29) y (30) sean integrables exactamente. En la mayoría de los casos, aunque ambos problemas sean resolubles exactamente, su composición no será la solución exacta del problema original (2). El problema lineal es fácilmente resoluble en el espacio de frecuencias. De hecho, utilizando la discretización espacial pseudoespectral (exponencialmente precisa con el número de frecuencias considerado cuando la solución es regular), lo que hay que resolver es el sistema

$$U_t = iA_N U$$

que se puede resolver exactamente por ser A_N constante. Por otro lado, según ya se notó en [48] la ecuación (30) conserva $|u(x, t)|$ en el tiempo con lo que para encontrar los valores modales de dicha solución basta integrar exactamente

$$U_t = i|U|^2 \cdot U$$

que puede tratarse como un sistema diferencial lineal de primer orden con matriz constante y diagonal con elementos $|U|^2$. Aquí, la notación \cdot denota en todo momento el producto componente a componente. Este sistema también es resoluble exactamente. La ecuación dada por (29) es la ecuación de Schrödinger lineal para una partícula libre y por lo tanto, de acuerdo con los resultados elementales de la *Mecánica Cuántica*, los invariantes I_1 e I_2 se conservan. Asimismo, no resulta complicado probar lo mismo para la ecuación (30). Por lo tanto, la composición de flujos asociados a ambos problemas conservará ambos invariantes. Finalmente decir que composiciones adecuadas de

los flujos anteriores pueden facilitar la construcción de integradores simétricos lo cual implica, además, la obtención de órdenes pares.

Capítulo 1

Integración Exponencial de Ondas Solitarias de la Ecuación Cúbica de Schrödinger.

1.1 Introducción.

Como ya se ha comentado en los preliminares, los métodos exponenciales integran la parte lineal y rígida de un sistema diferencial de modo exacto. Esto conduce al hecho de que sea posible construir métodos que sean al mismo tiempo explícitos y estables cuando se integran sistemas no lineales con solamente la parte lineal rígida, lo cual es algo que no pueden hacer los métodos clásicos. Este tipo de sistemas aparece tras la discretización espacial de ecuaciones en derivadas parciales. Los métodos exponenciales para la integración temporal de problemas parabólicos han sido bien estudiados y analizados en la literatura. En este caso no hay una estructura especial del sistema que conservar. Por el contrario, hay muchos sistemas hiperbólicos que poseen alguna estructura hamiltoniana y muchas propiedades cualitativas que se conservan. En este sentido, para problemas de segundo orden, se han construido bien métodos de tipo Gautschi [17] o bien métodos multipaso de

tipo coseno [13], los cuales son al mismo tiempo explícitos, exponenciales y geométricos, de modo que se consigue una integración muy eficiente hasta tiempos muy largos.

El objetivo del presente capítulo consiste en extender lo anteriormente citado a un problema hiperbólico particular pero de primer orden en el tiempo, que es la ecuación cúbica de Schrödinger. Cuando se buscan integradores geométricos para sistemas hamiltonianos de primer orden, debemos, en primer lugar, centrarnos en métodos de un paso ya que los métodos multipaso no son simplécticos y aquéllos que son simétricos se comportan bien para sistemas de segundo orden pero no para los de primer orden [15]. Sin embargo, cuando se analizan los métodos exponenciales de Runge-Kutta, se obtiene que la simplecticidad se pierde cuando los convertimos en exponenciales [25] y las condiciones de simetría para este tipo métodos (independientemente obtenidos en [16] y [25]) conducen a métodos implícitos.

La primera cuestión que se aborda en este capítulo es si los métodos simétricos exponenciales son más eficientes que los correspondientes clásicos simétricos/simplécticos para nuestra ecuación particular. Para ello, nos centraremos en algunos métodos de segundo orden, cuya comparación en términos de eficiencia no ha sido todavía realizada en la literatura. Vamos a considerar los integradores exponenciales de colocación [31] y de Lawson [8, 37]. Además, justificaremos el cuarto orden en los invariantes que se obtiene con estos métodos cuando se integran ondas solitarias de la ecuación cúbica de Schrödinger.

A continuación sugeriremos algunos esquemas exponenciales y explícitos de Lawson de segundo orden proyectados ortogonalmente sobre el invariante más simple del problema (I_1). Observaremos que, de esta manera, incluso sin simetría, se conservan las propiedades geométricas y por lo tanto se tiene un buen comportamiento a largo plazo. De este modo obtenemos una herramienta eficiente para integrar la ecuación no lineal de Schrödinger hasta tiempos largos.

El capítulo se estructura como sigue. En la sección 2 se dan algunos preliminares acerca del problema concreto a tratar y las expresiones de los invariantes en términos de las partes real e imaginaria de la función compleja tanto en el problema continuo como tras discretizar en espacio. En la sección 3 se justifican los desarrollos asintóticos del error para los métodos

exponenciales y se recuerda cómo pueden utilizarse estos para probar órdenes de precisión más altos en las cantidades conservadas. En la sección 4, comparamos computacionalmente algunos métodos geométricos e implícitos (exponenciales y no exponenciales) y se ofrece un análisis detallado del error en los principales invariantes del problema para todos ellos. Finalmente, en la sección 5, se sugieren los métodos exponenciales y explícitos proyectados ortogonalmente sobre I_1 . De nuevo se lleva a cabo un análisis detallado del error para el error en los invariantes antes de proyectar. Tras proyectar se muestran algunos resultados numéricos que corroboran su excelente comportamiento cuando se integran ondas solitarias. En la sección final se establecen las conclusiones.

1.2 Preliminares.

En este capítulo estamos interesados en la integración numérica del problema de valor inicial

$$\begin{aligned} iu_t + u_{xx} + |u|^2u &= 0, \quad x \in [a, b], \quad 0 \leq t \leq T, \quad -\infty < x < \infty, \\ u(x, 0) &= u_0(x) \in \mathbb{C}, \quad x \in [a, b]. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Si $u = v + iw$, con v, w como funciones reales, (1.1) es equivalente a

$$\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} -w_{xx} - (v^2 + w^2)w \\ v_{xx} + (v^2 + w^2)v \end{bmatrix}. \quad (1.2)$$

Como ya se dijo en la Sección 0.1, este problema continuo conserva unas cantidades conocidas generalmente como Hamiltoniano, norma y momento que en términos de v y w pueden escribirse como

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (v_x^2 + w_x^2 - \frac{1}{2}(v^2 + w^2)^2) dx, \\ I_1 &= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (v^2 + w^2) dx, \\ I_2 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (vw_x - wv_x) dx. \end{aligned}$$

Estamos especialmente interesados en las soluciones de (1.1) conocidas como ondas solitarias, cuya expresión es

$$u(x, t) = \rho_\alpha(x - ct - x_0) e^{i[\frac{1}{2}c(x-ct-x_0) + \theta_0 + (\alpha + \frac{1}{4}c^2)t]}, \quad (1.3)$$

para valores reales de α, c, θ_0, x_0 ($c > 0$) y $\rho_\alpha(x) = \sqrt{2\alpha} \operatorname{sech}(\sqrt{\alpha}x)$.

Para integrar numéricamente el problema (1.1), si nos centramos en soluciones que puedan ser consideradas nulas fuera de un cierto intervalo $[a, b]$, es habitual sustituir el problema (1.1) por el problema con condición inicial periódica

$$\begin{aligned} iu_t + u_{xx} + |u|^2u &= 0, & x \in [a, b], & 0 \leq t \leq T, \\ u(x, 0) &= u_0(x) \in \mathbb{C}, & x \in [a, b], \\ u(a, t) &= u(b, t), & 0 \leq t \leq T. \\ u_x(a, t) &= u_x(b, t). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Para este problema, según la sección 0.1 de los preliminares, se conservan las cantidades (3)-(4)-(5) expresadas en términos de v y w como

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int_a^b (v_x^2 + w_x^2 - \frac{1}{2}(v^2 + w^2)^2) dx, \\ I_1 &= -\frac{1}{2} \int_a^b (v^2 + w^2) dx, \\ I_2 &= \frac{1}{2} \int_a^b (vw_x - wv_x) dx. \end{aligned}$$

De esta forma, si la solución es regular, es bien sabido que la discretización pseudoespectral en espacio es muy precisa y considerando (1.2), según se justificó en la sección 0.2 de los preliminares, aparece el siguiente problema semidiscretizado

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} V_N \\ W_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A_N W_N - (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2) \cdot W_N \\ A_N V_N + (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2) \cdot V_N \end{bmatrix}, \quad (1.5)$$

donde cada una de las N componentes de V_N y W_N son las aproximaciones respectivas de v y w en los nodos $x_j = a + (b-a)j/N$ ($j = 0, 1, \dots, N-1$).

Como ya se justificó también en la sección 0.2 de los preliminares, teniendo en cuenta que A_N es simétrica, este sistema discretizado conserva las cantidades (13) y (14), escritas ahora siempre en términos de V_N y W_N como

$$I_{1,N} = -\frac{(b-a)}{2N} [\langle V_N, V_N \rangle + \langle W_N, W_N \rangle], \quad (1.6)$$

$$\begin{aligned}
H_N &= -\frac{(b-a)}{2N} [\langle W_N, A_N W_N \rangle + \langle V_N, A_N V_N \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2} \langle (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2), \mathbf{1}_N \rangle], \tag{1.7}
\end{aligned}$$

Además, $I_{1,N}$ y H_N son las discretizaciones naturales de los invariantes continuos I and H (respectivamente) correspondientes a (1.4). Por otra parte, asumiendo condiciones de regularidad de la solución, dadas por (C1)-(C5) en [12] y de acuerdo allí con el Teorema 6.7, la discretización de I_2 dada por

$$I_{2,N} = \frac{b-a}{2N} [\langle V_N, B_N W_N \rangle - \langle W_N, B_N V_N \rangle],$$

es también una cantidad cuasinvariante del problema (1.5) en el sentido de que

$$\frac{d}{dt} I_{2,N} = O(N(1 + te^{-N})^4 e^{-\beta N}), \tag{1.8}$$

donde $\beta > 0$ depende de la regularidad del problema y la constante implícita de Landau es independiente de N y t . Obsérvese que (1.8) decae muy rápidamente a cero cuando N crece, por lo que en la práctica, para valores moderados de N , $I_{2,N}$ también puede considerarse invariante del problema cerca de la solución regular en la cual estamos interesados.

En lo que sigue haremos la hipótesis de que cuando $N \rightarrow \infty$ la solución de (1.5) converge a los valores nodales de (1.4). En particular, en la norma L^2 discreta, la solución de (1.5) convergerá a la solución de (1.4).

Nos centraremos en este capítulo en los métodos exponenciales de tipo Runge-Kutta descritos en la Sección 0.3.1 de los preliminares. Más concretamente, métodos de colocación y Lawson. De las condiciones de simetría allí descritas se deduce que es imposible obtener métodos simétricos que sean explícitos. En cualquier caso recordemos que es imposible de nuevo obtener métodos Runge-Kutta clásicos simplécticos y explícitos al mismo tiempo. En cuanto a la conservación de invariantes cuadráticos, cuando el método Runge-Kutta subyacente es simpléctico, se ha probado [16, 25] que los métodos de colocación ya no los conservan, mientras que los métodos de Lawson [16] sí conservan invariantes cuadráticos siempre que se den algunas condiciones. Más concretamente, aplicando el resultado en [16] a la integración del sistema (1.5) donde denotaremos por L_N a la matriz en (12) cambiada de signo,

los invariantes cuadráticos de la forma

$$(V_N^T W_N^T) C_N \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix}$$

para una matriz real C_N de tamaño $(2N) \times (2N)$ se conservan si $(C_N e^{hL_N})^T = C_N e^{-hL_N}$. Como A_N es simétrica, claramente se tiene que $L_N^T = -L_N$. Por lo tanto, siempre que C_N sea simétrica y C_N y L_N conmuten se satisfará dicha condición. Notemos que para el invariante $I_{1,N}$ la matriz C_N es, salvo la multiplicación por un escalar, la matriz identidad y las condiciones se cumplen. Asimismo, para $I_{2,N}$, podemos tomar

$$C_N = \frac{b-a}{2N} \begin{bmatrix} O & B_N \\ -B_N & O \end{bmatrix}.$$

Aquí se denota por B_N la parte real de la matriz que implementa la primera derivada del interpolante trigonométrico dado por (6), y que ya apareció en los preliminares en (15). Del hecho de que $B_N^T = -B_N$ [12] se deduce que C_N es simétrica y del hecho de que A_N conmuta con B_N se tiene que C_N conmuta con L_N . Esto implica que $I_{1,N}$ se conserva y, con una ligera modificación del argumento allí dado, $I_{2,N}$ es cuasi-conservado. Para ver que A_N conmuta con la parte real anteriormente mencionada basta con observar que $A_N = (B_N + iE_N)^2$ de donde, teniendo en cuenta que A_N es real (11), necesariamente se tiene que B_N anticonmuta con E_N . Utilizando este hecho y calculando por separado $A_N B_N$ y $B_N A_N$ se comprueba la conmutación de dichas matrices.

1.3 Validez del desarrollo asintótico del error para los métodos exponenciales y su utilización para probar órdenes más altos de precisión de las cantidades conservadas.

Para métodos clásicos, cuando se integra un sistema diferencial ordinario de la forma

$$u'(t) = F(u(t))$$

existen teoremas que relacionan los coeficientes del desarrollo asintótico del error local con aquellos del error global [29]. En esta sección nos proponemos confirmar la validez de dichos resultados también para los métodos exponenciales descritos previamente y recordar las implicaciones que esto tiene a nivel de aproximar invariantes. De acuerdo con [22, 29] tenemos el siguiente teorema.

Teorema 1.3.1 *Supongamos que un método viene dado por una ecuación en diferencias como*

$$U_{n+1} = U_n + h\phi(U_n, h),$$

con una función incremento suficientemente suave ϕ , la cual satisface las condiciones de consistencia $\phi(U, 0) = F(U)$, $\phi_h(U, 0) = \frac{1}{2}F'(U)F(U)$ y posee un desarrollo asintótico para el error local dado por

$$\begin{aligned} U(t^{n+1}) - U(t^n) - h\phi(U(t^n), h) \\ = d_{p+1}(t^n)h^{p+1} + d_{p+2}(t^n)h^{p+2} + O(h^{p+3}), \quad t^n = nh, \end{aligned} \quad (1.9)$$

siempre que la ecuación diferencial sea suficientemente diferenciable. Entonces, el error global tiene un desarrollo asintótico de la forma

$$U(t^n) - U^n = e_p(t^n)h^p + e_{p+1}(t^n)h^{p+1} + E_h(t^n)h^{p+2}, \quad (1.10)$$

donde $e_p(t)$ y $e_{p+1}(t)$ son las soluciones de los problemas diferenciales no homogéneos

$$\begin{aligned} e_p'(t) &= F'(U(t))e_p(t) + d_{p+1}(t), \\ e_p(0) &= 0, \\ e_{p+1}'(t) &= F'(U(t))e_{p+1}(t) + d_{p+2}(t) - \frac{1}{2}F'(U(t))d_{p+1}(t) - \frac{1}{2}d_{p+1}'(t), \\ e_{p+1}(0) &= 0, \end{aligned}$$

y $E_h(t)$ está acotado por $t \in [0, T]$ con h lo suficientemente pequeño.

El siguiente lema establece cuándo es posible aplicar el teorema previo a los métodos exponenciales de tipo Runge-Kutta.

Lema 1.3.2 *Siempre que un método exponencial de tipo Runge-Kutta satisfaga*

$$\sum_{r=1}^s b_r(0) = 1, \quad (1.11)$$

$$\sum_{r=1}^s b'_r(0) = \frac{1}{2}, \quad \sum_{r=1}^s b_r(0)c_r = \frac{1}{2}, \quad \sum_{r=1}^s b_r(0)a_{rj}(0) = \frac{1}{2}, \quad (1.12)$$

las hipótesis necesarias para aplicar el Teorema 1.3.1 se satisfacen. De hecho, (1.11) es la única condición que se necesita para obtener el primer término del desarrollo asintótico.

Obsérvese también que (1.11) y (1.12) son las condiciones de orden dos no rígidas establecidas en [7, 32] para los métodos exponenciales.

Prueba. El tipo de problemas a los que se aplican los métodos exponenciales son de la forma

$$\begin{aligned} \dot{U}(t) &= LU(t) + g(U(t)) := F(U), \quad t \in [0, T], \\ U(0) &= U^0. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Basta con observar que, en nuestro caso,

$$\phi(U, h) = \frac{e^{hL} - I}{h}U + \sum_{r=1}^s b_r(hL)g(K_r),$$

con K_r en (18). Por lo tanto, mediante (1.11),

$$\phi(U, 0) = LU + \left[\sum_{r=1}^s b_r(0) \right] g(U) := F(U).$$

Por otro lado, utilizando (1.12),

$$\begin{aligned}
\phi_h(U, 0) &= \frac{1}{2}L^2U + \sum_{r=1}^s Lb'_r(0)g(U) \\
&\quad + \sum_{r=1}^s b_r(0)g'(U)[c_rLU + \sum_{j=1}^s a_{rj}(0)g(U)] \\
&= \frac{1}{2}L^2U + \frac{1}{2}Lg(U) + \frac{1}{2}g'(U)LU + \frac{1}{2}g'(U)g(U) := \frac{1}{2}F'(U)F(U),
\end{aligned}$$

de donde se sigue el resultado. \square

Comentario 1.3.3 *Es de destacar aquí que, cuando la solución del problema continuo (1.1) sea lo suficientemente regular, el error local para el método exponencial aplicado a (1.5) será tal que $d_{p+1,N}(t)$, $d_{p+2,N}(t)$ y la constante implícita en el término restante de (1.9) estarán acotados independientemente de N para N lo suficientemente grande. Eso implicará que $E_{h,N}$ en (1.10) también estará acotado independientemente de N .*

Nótese ahora que, de (1.10), para cualquier cantidad I ,

$$\begin{aligned}
I(U(t^n)) - I(U^n) &= \langle \nabla I(U(t^n)), e_p(t^n) \rangle h^p \\
&\quad + \langle \nabla I(U(t^n)), e_{p+1}(t^n) \rangle h^{p+1} + O(h^{p+2}).
\end{aligned}$$

De aquí se sigue el siguiente resultado:

Lema 1.3.4 *Para cualquier integral primera I de (1.13),*

$$I(U(t^n)) - I(U^n) = O(h^{p+1}) \Leftrightarrow \langle \nabla I(U(t^n)), d_{p+1}(t^n) \rangle = 0. \quad (1.14)$$

En el caso particular de que el método sea simétrico,

$$I(U(t^n)) - I(U^n) = O(h^{p+2}) \Leftrightarrow \langle \nabla I(U(t^n)), d_{p+1}(t^n) \rangle = 0. \quad (1.15)$$

Prueba. Esto proviene del hecho de que

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt} \langle \nabla I(U(t)), e_p(t) \rangle \\
&= \langle \nabla I(U(t)), F'(U(t))e_p(t) + d_{p+1}(t) \rangle \\
&\quad + \langle Hess(I)(U(t))\dot{U}(t), e_p(t) \rangle \\
&= \langle \nabla I(U(t)), d_{p+1}(t) \rangle \\
&\quad + \langle [F'(U(t))]^T \nabla I(U(t)) + Hess(I)(U(t))F(U(t)), e_p(t) \rangle. \quad (1.16)
\end{aligned}$$

Obsérvese ahora que del hecho de que $I(U(t))$ es constante una vez que la condición inicial se ha fijado, para cualquier condición inicial, se sigue, mediante derivación con respecto al tiempo que

$$\langle \nabla I(U), F(U) \rangle = 0. \quad (1.17)$$

De donde, calculando la diferencial con respecto a U ,

$$F'(U)^T \nabla I(U) + Hess(I)(U)F(U) = 0.$$

Mediante sustitución en (1.16) y considerando que $e_p(0) = 0$, se sigue el resultado.

En el caso particular de que el método sea simétrico, como el desarrollo asintótico solo contiene potencias pares de h [29],

$$I(U(t^n)) - I(U^n) = \langle \nabla I(U(t^n)), e_p(t^n) \rangle + O(h^{p+2}),$$

y con el mismo argumento anterior, (1.15) queda probado. \square

1.4 Comparación de métodos implícitos geométricos.

En [16] se muestran algunos resultados numéricos del comportamiento de algunos métodos exponenciales de orden dos cuando se integra la ecuación cúbica de Schrödinger. Sin embargo, falta allí una medición de la eficiencia computacional para observar si la integración exponencial merece la pena frente a la integración clásica. Por otra parte, un profundo estudio del orden de los métodos para los tres invariantes, al menos cuando se integran ondas solitarias, no se ha hecho todavía y es nuestro objetivo en este capítulo.

Consideraremos los siguientes métodos:

- Regla de punto medio implícita y clásica (**MR**)
- Regla de punto medio exponencial de Lawson (**LEMR**)
- Regla de punto medio exponencial de colocación (**CEMR**)

- Regla de punto medio exponencial y de colocación ortogonalmente proyectada sobre I_1 (**CEMROP**)
- Regla de punto medio exponencial y de colocación simétricamente proyectada sobre I_1 (**CEMRSP**)

Obsérvese que MR, LEMR, CEMR y CEMRSP son métodos simétricos mientras que CEMROP no lo es. Nótese también que MR, LEMR, CEMROP y CEMRSP conservan exactamente $I_{1,N}$ cuando se integra (1.5) mientras que CEMR no. Por último, obsérvese que MR y LEMR casi conservan $I_{2,N}$ mientras que CEMR, CEMROP y CEMRSP no.

De acuerdo con [19], cuando se integran ondas solitarias, si los métodos satisfacen

$$\begin{aligned} (\nabla I_{1,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{p+1,N} &\rightarrow_{N \rightarrow \infty} 0, \\ (\nabla I_{2,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{p+1,N} &\rightarrow_{N \rightarrow \infty} 0, \end{aligned} \quad (1.18)$$

el error en la norma discreta L^2 de la solución crece linealmente con el tiempo. Nótese que ambas condiciones se satisfacen automáticamente para MR y LEMR a causa de (1.14) para los órdenes clásicos de los correspondientes métodos, el cual es $p = 2$ [7]. De la misma manera, la primera de esas condiciones se satisface automáticamente en CEMROP y CEMRSP. Lo que probaremos en las siguientes subsecciones es que CEMR también satisface (1.18), de donde se sigue que CEMROP y CEMRSP también satisfacen la segunda condición en (1.18). Esto justificará que **el error en la norma discreta L^2 de la solución crezca linealmente con el tiempo para todos los métodos considerados.**

Por otro lado, también se estableció en [19] que, para una onda solitaria u , $\delta H(u)$ es una combinación lineal de $\delta I_1(u)$ y $\delta I_2(u)$. Eso implica que, cuando (1.18) se satisface, también ocurre que

$$(\nabla H_N)^T (V_N, W_N)^T \cdot d_{p+1,N} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} 0. \quad (1.19)$$

De todo esto y de nuevo de acuerdo con (1.14), el error en los tres invariantes H_N , $I_{1,N}$ y $I_{2,N}$ cuando se integran ondas solitarias mostrará al menos orden 3. El hecho de que MR, LEMR, CEMR y CEMRSP sean simétricos implica que tienen orden par [29] y, por lo tanto, al menos orden 4. Finalmente, dado

que CEMROP es simplemente una ligera modificación de CEMR, también probaremos, en la siguiente subsección, que se tiene orden 4 en las tres cantidades. Como conclusión, **el error en los tres invariantes mostrará, al menos, orden 4 en todos los métodos considerados.**

1.4.1 Error en $I_{1,N}$ para CEMR.

CEMR se corresponde con (17)-(18) siendo $s = 1$, $a_{11}(z) = (e^{\frac{z}{2}} - 1)/z$, $b(z) = (e^z - 1)/z$ y $\chi_1(z) = e^z$. Fácilmente se puede deducir que el término $d_3(t)$ en el error local de truncación cuando se aplica a (1.13) es

$$d_3(t) = -\frac{1}{12}Lg'F + \frac{1}{24}g'LF - \frac{1}{12}g'g'F + \frac{1}{24}g''[F, F], \quad (1.20)$$

donde g', F, g'' se suponen evaluadas en $U(t)$. De aquí se sigue el siguiente teorema.

Teorema 1.4.1 *La regla de punto medio exponencial de colocación, cuando se aplica al sistema semidiscretizado (1.5) en espacio para (1.4), satisface que*

$$(\nabla I_{1,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{3,N} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{48} \frac{d}{dt} \int_a^b |u_{xx}|^2 dx.$$

Prueba. Obsérvese que $(\nabla I_{1,N})(V_N^T, W_N^T)^T = -\frac{b-a}{N}(V_N^T, W_N^T)^T$. De lo que, tras algunos cálculos tediosos, considerando que

$$L_N = \begin{pmatrix} 0 & -A_N \\ A_N & 0 \end{pmatrix}, \quad g_N \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(V_N.^2 + W_N.^2) \cdot W_N \\ (V_N.^2 + W_N.^2) \cdot V_N \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

y que A_N es simétrica, se sigue que

$$\begin{aligned} & (\nabla I_{1,N})^T L_N g'_N F_N \\ &= -\frac{b-a}{N} [2(V_N.^2)^T (A_N V_N \cdot A_N W_N) + (V_N.^4 W_N)^T A_N V_N \\ &\quad + 2(V_N.^2 W_N.^3)^T A_N V_N - 2(W_N.^2)^T (A_N V_N \cdot A_N W_N) \\ &\quad - 2(V_N \cdot W_N)^T (A_N V_N \cdot A_N V_N) - (V_N \cdot W_N.^4)^T A_N W_N \\ &\quad - 2(V_N.^3 W_N.^2)^T A_N W_N + 2(V_N \cdot W_N)^T (A_N W_N \cdot A_N W_N) \\ &\quad - (V_N.^5)^T A_N W_N + (A_N V_N)^T W_N.^5]. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Esto se obtiene del hecho de

$$g'_N = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix},$$

donde

$$\begin{aligned} G_{11} &= \text{diag}(-2V_{N,i}W_{N,i}), \\ G_{12} &= \text{diag}(-V_{N,i}^2 - 3W_{N,i}^2), \\ G_{21} &= \text{diag}(3V_{N,i}^2 + W_{N,i}^2), \\ G_{22} &= \text{diag}(2V_{N,i}W_{N,i}). \end{aligned}$$

De aquí puede obtenerse fácilmente

$$L_N g'_N F_N = \begin{bmatrix} A_N((3V_N.^2 + W_N.^2).A_N W_N - 2(V_N.W_N.).A_N V_N + (V_N.^2 + W_N.^2).^2.W_N) \\ A_N(2(V_N.W_N).A_N W_N - (V_N.^2 + 3W_N.^2).A_N V_N - (V_N.^2 + W_N.^2).^2.V_N) \end{bmatrix}.$$

Multiplicando la expresión anterior por la izquierda por $\nabla I_{1,N}^T$, agrupando la matriz A_N con las componentes de $\nabla I_{1,N}^T$ y simplificando términos se obtiene la expresión buscada. De forma análoga

$$\begin{aligned} &(\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N F_N \\ &= -\frac{b-a}{N} [- (V_N.^2 W_N)^T A_N^2 V_N + (V_N.^3)^T A_N^2 W_N \\ &\quad + (V_N.W_N.^2)^T A_N^2 W_N - (W_N.^3)^T A_N^2 V_N], \end{aligned} \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} &(\nabla I_{1,N})^T g'_N g'_N F_N \\ &= -\frac{b-a}{N} [6(V_N.^3 W_N.^2)^T A_N W_N + 3(V_N.^5)^T A_N W_N \\ &\quad - 6(V_N.^2 W_N.^3)^T A_N V_N - 3(W_N.V_N.^4)^T A_N V_N \\ &\quad + 3(V_N.W_N.^4)^T A_N W_N - 3(W_N.^5)^T A_N V_N] \end{aligned} \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned} &(\nabla I_{1,N})^T g''_N [F_N, F_N] \\ &= -\frac{b-a}{N} [4(V_N.W_N)^T (A_N W_N).^2 + 4(V_N.W_N.^4)^T A_N W_N \\ &\quad + 4(V_N.^2)^T (A_N W_N.A_N V_N) + 4(V_N.^5)^T A_N W_N \\ &\quad - 4(V_N.^4 W_N)^T A_N V_N - 8(V_N.^2 W_N.^3)^T A_N V_N \\ &\quad - 4(V_N.W_N)^T (A_N V_N.A_N V_N) + 8(V_N.^3 W_N.^2)^T A_N W_N \\ &\quad - 4(W_N.^2)^T (A_N V_N.A_N W_N) - 4(W_N.^5)^T A_N V_N]. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Ahora, considerando los coeficientes de (1.20), se puede ver que los únicos términos que no se cancelan son los correspondientes a $(\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N F_N$. Además, teniendo en cuenta que A_N aproxima la segunda derivada y considerando la regla de cuadratura del rectángulo como una aproximación a una integral,

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N F_N \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} - \int_a^b [-v^2 w v_{xxxx} + v^3 w_{xxxx} + v w^2 w_{xxxx} - w^3 v_{xxxx}] dx \\
& = - \int_a^b (v^2 + w^2)(-w v_{xxxx} + v w_{xxxx}) dx \\
& = - \int_a^b [(v_t + w_{xx})v_{xxxx} + (w_t - v_{xx})w_{xxxx}] dx, \tag{1.26}
\end{aligned}$$

donde se ha utilizado (1.2) en la última igualdad. Ahora, obsérvese que la periodicidad de v, w en espacio para cualquier valor del tiempo implica (a causa de (1.2)) lo mismo para v_{xx} y w_{xx} . De la misma forma, tras derivar (1.2) con respecto a x , la periodicidad de v_x y w_x en espacio implica la de v_{xxx} y w_{xxx} . Utilizando esto e integración por partes,

$$\int_a^b (w_{xx} v_{xxxx} - v_{xx} w_{xxxx}) dx = 0.$$

Teniendo en cuenta esto e integrando dos veces por partes de nuevo en (1.26),

$$\begin{aligned}
(\nabla I_{1,N})^T d_{3,N} & \rightarrow_{N \rightarrow \infty} - \frac{1}{24} \int_a^b (v_{txx} v_{xx} + w_{txx} w_{xx}) dx \\
& = - \frac{1}{48} \frac{d}{dt} \left[\int_a^b (v_{xx}^2 + w_{xx}^2) dx \right],
\end{aligned}$$

que es el resultado buscado. \square

Comentario 1.4.2 *Obsérvese que, si u es la onda solitaria (1.3),*

$$|u_{xx}(x, t)|^2 = |(\rho''_\alpha + i c \rho'_\alpha - \frac{c^2}{4} \rho_\alpha)(x - ct - x_0)|^2, \tag{1.27}$$

cuya integral en $(-\infty, \infty)$ es independiente del tiempo t , y sobre $[a, b]$ también puede considerarse independiente del tiempo t para valores no demasiado grandes de t e intervalos $[a, b]$ suficientemente amplios. Considerando esto en el Teorema 1.4.1, la primera parte de (1.18) queda probada para CEMR y, debido a la simetría del método y (1.15), queda justificado el orden 4 para el error en $I_{1,N}$ para este método cuando se integra una onda solitaria.

1.4.2 Error en $I_{2,N}$ para CEMR

El siguiente lema nos permitirá probar más cómodamente cómo es el error en $I_{2,N}$.

Lema 1.4.3 *Para cualquier función compleja suficientemente diferenciable u definida en $[a, b]$ y para cualesquiera $u(a) = u(b)$, $u_x(a) = u_x(b)$, $u_{xx}(a) = u_{xx}(b)$, $u_{xxx}(a) = u_{xxx}(b)$, se tiene que*

$$\int_a^b (u^3 u^{*4} u_x + u^4 u^{*3} u_x^*) dx = 0, \quad (1.28)$$

$$\int_a^b (u_x^2 u_x^* u_{xxx}^* + u_x^{*2} u_x u_{xxx}) dx = 0, \quad (1.29)$$

$$\int_a^b (u^3 u_x^{*3} + 2u^3 u^* u_x^* u_{xx}^* + 3u^2 u^* u_x u_x^{*2}) dx = 0, \quad (1.30)$$

$$\int_a^b [u^2 u^{*2} (u_x^* u_{xxx} + u_x u_{xxx}^*) + 2(u u^{*2} u_x^2 u_x^* + u^* u^2 u_x^{*2} u_x)] dx = 0, \quad (1.31)$$

$$\int_a^b [2(u u_x^* u_{xxx} u_{xxx}^* + u^* u_x u_{xxx} u_{xxx}^*) + u u_x^{*2} u_{xxx} + u^* u_x^2 u_{xxx}^*] dx = 0, \quad (1.32)$$

$$\int_a^b [u^* u_x^* u_{xxx}^2 + u^{*2} u_{xx} u_{xxx}] dx = 0, \quad (1.33)$$

$$\int_a^b [u^2 u_x^* u_{xxxx}^* + 2(u u_x u_x^* u_{xxx}^*) + u^2 u_{xx}^* u_{xxx}^*] dx = 0, \quad (1.34)$$

$$\int_a^b [u u_x^* u_{xxxx}^* + u^* u_x u_{xxx}^* + u u_x^{*2} u_{xxx} + u u_x^* u_{xxx}^*] dx = 0, \quad (1.35)$$

$$\int_a^b [u^2 u_{xx}^* u_{xxx}^* + u u_x u_{xxx}^{*2}] dx = 0, \quad (1.36)$$

$$\int_a^b [uu_x u_x^* u_{xxx}^* + uu_x^* u_{xx} u_{xx}^* + uu_x u_{xx}^{*2} + u_{xx}^* u_x^2 u_x^*] dx = 0, \quad (1.37)$$

$$\int_a^b [uu^* u_{xx}^* u_{xxx} + u^* u_x u_{xx} u_{xx}^* + uu_x^* u_{xx} u_{xx}^* + uu^* u_{xx} u_{xxx}^*] dx = 0. \quad (1.38)$$

Prueba. (1.28) simplemente viene del hecho de que el integrando es igual a $\frac{1}{4} \frac{d}{dx}(u^4 u^{*4})$. De modo similar, (1.29) procede del hecho de que el integrando puede escribirse como $\frac{1}{2} \frac{d}{dx}[(u_x u_x^*)^2]$. En (1.30), el integrando es $\frac{d}{dx}(u^3 u^* u_x^{*2})$. En (1.31), $\frac{d}{dx}((u^2 u^{*2})(u_x u_x^*))$. (1.32) se prueba integrando por partes y usando (1.29). En (1.33), el integrando es $\frac{1}{2} \frac{d}{dx}(u^{*2} u_{xx}^2)$, por lo que se sigue el resultado. En (1.34), el integrando es $\frac{d}{dx}(u^2 u_x^* u_{xxx}^*)$. En (1.35), $\frac{d}{dx}(uu^* u_x^* u_{xxx})$. (1.36) se prueba integrando por partes en $\int_a^b u^2 u_x^* u_{xxx}^*$ intentando eliminar la tercera derivada. En (1.37), el integrando es $\frac{d}{dx}(uu_x u_x^* u_{xx}^*)$ y también $\frac{d}{dx}(uu^* u_{xx} u_{xx}^*)$ en (1.38). \square

Teorema 1.4.4 *La regla de punto medio exponencial de colocación, cuando se aplica al sistema semidiscretizado (1.5) como discretización espacial para (1.4), satisface*

$$\begin{aligned} & (\nabla I_{2,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{3,N} \\ & \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \frac{5}{48} \int_a^b [uu_x u_{xx}^{*2} + u^* u_x^* u_{xx}^2 + 2u_{xx} u_x^* (uu_x^* + u^* u_x)] dx. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Prueba. En primer lugar, obsérvese que

$$\nabla I_{2,N} \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} = \frac{b-a}{2N} \begin{pmatrix} (B_N - B_N^T)W_N \\ (B_N^T - B_N)V_N \end{pmatrix} = \frac{b-a}{N} \begin{pmatrix} B_N W_N \\ -B_N V_N \end{pmatrix},$$

donde se ha utilizado el hecho de que $B_N^T = -B_N$. Utilizando esto y la regla de cuadratura del rectángulo como aproximación a una integral, como en la subsección previa,

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T L_N g'_N F_N \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [w_x((3v^2 + w^2)w_{xx})_{xx} - 2w_x(vwv_{xx})_{xx} \\
& \quad - 2v_x(vww_{xx})_{xx} + v_x((3w^2 + v^2)v_{xx})_{xx} \\
& \quad + w_x(w(v^2 + w^2)^2)_{xx} + v_x(v(v^2 + w^2)^2)_{xx}] dx, \tag{1.40}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T g'_N L_N F_N \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [2w_xvwv_{xxxx} + w_x(3w^2 + v^2)w_{xxxx} \\
& \quad + v_x(3v^2 + w^2)v_{xxxx} + 2v_xvwv_{xxxx} \\
& \quad + 2w_xvw((v^2 + w^2)v)_{xx} + w_x(3w^2 + v^2)((v^2 + w^2)w)_{xx} \\
& \quad + v_x(3v^2 + w^2)((v^2 + w^2)v)_{xx} + 2v_xvw((v^2 + w^2)w)_{xx}] dx, \tag{1.41}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T g'_N g'_N F_N \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [3w_x(v^2 + w^2)^2w_{xx} + 3v_x(v^2 + w^2)^2v_{xx} \\
& \quad + 3w_xw(v^2 + w^2)^3 + 3v_xv(v^2 + w^2)^3] dx, \tag{1.42}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T g''_N [F_N, F_N] \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [-2w_xww_{xx}^2 + 4w_xvw_{xx}v_{xx} - 6w_xwv_{xx}^2 \\
& \quad + 4w_xw_{xx}(v^2 - w^2)(v^2 + w^2) - 8w_xv_{xx}vw(v^2 + w^2) \\
& \quad - 2w_xw^3(v^2 + w^2)^2 - 2w_xv^2w(v^2 + w^2)^2 - 2v_xv_{xx}^2 \\
& \quad + 4v_xwv_{xx}w_{xx} - 6v_xvw_{xx}^2 + 4v_xv_{xx}(w^2 - v^2)(v^2 + w^2) \\
& \quad - 8v_xw_{xx}vw(v^2 + w^2) - 2v_xv^3(v^2 + w^2)^2 \\
& \quad - 2v_xvw^2(v^2 + w^2)^2] dx. \tag{1.43}
\end{aligned}$$

Mediante el uso de los coeficientes para d_3 en (1.20), las expresiones anteriores y simplificando con Mathematica[®] haciendo uso de $u = v + iw$, se tiene que

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{3,N} \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{48} \int_a^b [8u^3u^{*4}u_x + 2u^{*3}u_x^3 + 8u^4u^{*3}u_x^* + 20uu^{*2}u_x^2u_x^* + 20u^2u^*u_xu_x^{*2} \\
& \quad + 2u^3u_x^{*3} + 4uu^{*3}u_xu_{xx} + 7u^2u^{*2}u_x^*u_{xx} + 4u_xu_x^{*2}u_{xx} \\
& \quad + 2u^*u_x^*u_{xx}^2 + 7u^2u^{*2}u_xu_x^* + 4u^3u^*u_x^*u_{xx} + 4u_x^2u_x^*u_x^*] dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +4u^*u_xu_{xx}u_{xx}^* + 4uu_x^*u_{xx}u_{xx}^* + 2uu_xu_{xx}^{*2} + 8uu_x^{*2}u_{xxx} \\
& +8u^*u_x^2u_{xxx}^* - 3u^{*2}u_xu_{xxx} + 2uu^*u_x^*u_{xxx} + 2uu^*u_xu_{xxx}^* \\
& -3u^2u_x^*u_{xxx}^*] dx.
\end{aligned}$$

Utilizando ahora (1.28) y (1.29), algunos términos se anulan. A continuación, usando (1.30) y su conjugado y (1.31) y (1.32), la expresión anterior se puede escribir como

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{48} \int_a^b [2uu_xu_{xx}^{*2} + 2u^*u_x^*u_{xx}^2 + 6uu_x^{*2}u_{xxx} + 6u^*u_x^2u_{xxx}^* \\
& -3u^2u_x^*u_{xxx}^* - 3u^{*2}u_xu_{xxx} + 2uu^*u_x^*u_{xxx} + 2uu^*u_xu_{xxx}^*] dx.
\end{aligned}$$

Entonces, utilizando (1.33), (1.34) y (1.35) y sus conjugados, esa expresión se puede escribir como

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{48} \int_a^b [u^2u_{xx}^*u_{xxx}^* + u^{*2}u_{xx}u_{xxx} + 4uu_xu_x^*u_{xxx}^* + 4u^*u_xu_x^*u_{xxx} \\
& +4uu_x^{*2}u_{xxx} + 4u^*u_x^2u_{xxx}^* - 2uu^*u_{xx}^*u_{xxx} - 2uu^*u_{xx}u_{xxx}^*] dx.
\end{aligned}$$

Usando ahora (1.36)-(1.37) y sus conjugados, (1.32) y (1.38), se puede escribir como

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{48} \int_a^b [-u_{xx}^*(u^2u_{xxx}^* + 2uu_xu_{xx}^*) - u_{xx}(u^{*2}u_{xxx} + 2u^*u_x^*u_{xx}) \\
& -4u_{xx}^*(u_x^2u_x^* + uu_x^*u_{xx} + uu_xu_{xx}^*) - 4u_{xx}(u_x^{*2}u_x + u^*u_x^*u_{xx} + u^*u_xu_{xx}^*) \\
& -4u_{xx}(u_xu_x^{*2} + 2uu_x^*u_{xx}^*) - 4u_{xx}^*(u_x^*u_x^2 + 2u^*u_xu_{xx}) \\
& +2(uu_x^*u_{xx}u_{xx}^* + u^*u_xu_{xx}u_{xx}^*)] dx.
\end{aligned}$$

Simplificando aquí términos y usando (1.29) y (1.33) y su conjugado, esa expresión puede finalmente escribirse como

$$\frac{5}{48} \int_a^b [uu_xu_{xx}^{*2} + u^*u_x^*u_{xx}^2 + 2u_{xx}u_{xx}^*(uu_x^* + u^*u_x)] dx,$$

lo cual constituye el resultado buscado. \square

Comentario 1.4.5 *Obsérvese que, si u es la onda solitaria (1.3), llevando a cabo los cálculos correspondientes,*

$$\int_{-\infty}^{\infty} [uu_xu_{xx}^{*2} + u^*u_x^*u_{xx}^2 + 2u_{xx}u_{xx}^*(uu_x^* + u^*u_x)] dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} [3\rho_\alpha \rho'_\alpha (\rho''_\alpha)^2 - \frac{c^2}{2} \rho_\alpha^2 \rho'_\alpha \rho''_\alpha - \frac{c^4}{16} \rho_\alpha^3 \rho'_\alpha + c^2 \rho_\alpha (\rho'_\alpha)^3] dx = 0. \quad (1.44)$$

La última igualdad proviene del hecho de que $\rho_\alpha(x)$ en (1.3) es una función par y, por lo tanto, la función entre paréntesis en (1.44) es impar. Por lo tanto, para un intervalo $[a, b]$ suficientemente grande y un valor de t no muy grande, la expresión (1.39) puede considerarse despreciable, de donde la segunda parte en (1.18) se satisface, lo cual justifica el orden 4 en $I_{2,N}$ a causa de la simetría, de acuerdo con (1.15).

1.4.3 Errores en $I_{1,N}$ y $I_{2,N}$ para CEMROP y CEMRSP.

Primeramente obsérvese el hecho de que $\nabla I_{1,N}(V_N^T, W_N^T)^T = -\frac{b-a}{N}(V_N^T, W_N^T)^T$ implica que llevar a cabo la proyección ortogonal de cualquier método numérico sobre $I_{1,N}$ simplemente consiste en multiplicar por alguna cantidad escalar. Con mayor precisión, si un método numérico lleva $(V_N^{nT}, W_N^{nT})^T$ a $\psi_h((V_N^{nT}, W_N^{nT})^T)$, su proyección ortogonal lleva $(V_N^{nT}, W_N^{nT})^T$ a $(V_N^{n+1T}, W_N^{n+1T})^T$, con

$$\begin{pmatrix} V_N^{n+1} \\ W_N^{n+1} \end{pmatrix} = \beta_{n,h,N} \psi_h \begin{pmatrix} V_N^n \\ W_N^n \end{pmatrix}, \quad (1.45)$$

donde

$$\beta_{n,h,N} = \sqrt{\frac{I_{1,N}((V_N^{nT}, W_N^{nT})^T)}{I_{1,N}(\psi_h((V_N^{nT}, W_N^{nT})^T))}}. \quad (1.46)$$

Nótese que este procedimiento es explícito una vez que $\psi_h((V_N^{nT}, W_N^{nT})^T)$ se conoce. Por lo tanto, resulta muy barato. Sin embargo, si el método original es simétrico, este hecho rompe la simetría. Entonces, otro procedimiento para conservar la simetría consiste en llevar a cabo una proyección simétrica [27]. En nuestro caso, el método quedaría descrito por

$$(1 + \mu_{n,h,N}) \begin{pmatrix} V_N^{n+1} \\ W_N^{n+1} \end{pmatrix} = \psi_h \left((1 - \mu_{n,h,N}) \begin{pmatrix} V_N^n \\ W_N^n \end{pmatrix} \right), \quad (1.47)$$

$$I_{1,N} \begin{pmatrix} V_N^{n+1} \\ W_N^{n+1} \end{pmatrix} = I_{1,N} \begin{pmatrix} V_N^n \\ W_N^n \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

Obsérvese que el procedimiento de proyección es ahora implícito dado que el valor de $\mu_{n,h,N}$ se determina resolviendo conjuntamente (1.47) y (1.48) mediante iteración de punto fijo.

Dada su construcción, el error en $I_{1,N}$ para CEMROP se anula. Para estudiar su error en $I_{2,N}$, estudiemos en primer lugar su error local.

Teorema 1.4.6 *El error local de truncación correspondiente a la regla de punto medio exponencial de colocación ortogonalmente proyectado sobre $I_{1,N}$, cuando se aplica al sistema semidiscretizado (1.5), puede escribirse como*

$$h^3 \left[d_{3,N} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla I_{1,N})^T ((V_N^T, W_N^T)^T) d_{3,N}}{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T)} \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} \right] + O(h^5), \quad (1.49)$$

donde $d_{3,N}$ es el término principal del error local de truncación correspondiente a CEMR.

Prueba. A causa de (1.45), ese error local de truncación es

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^{n+1}) - \beta_{n,h,N} \psi_h \left(\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) \\ &= \left[\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^{n+1}) - \psi_h \left(\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) \right] \\ & \quad + (1 - \beta_{n,h,N}) \psi_h \left(\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right), \end{aligned} \quad (1.50)$$

donde ψ_h corresponde a CEMR. Ahora es suficiente observar que

$$\psi_h((V_N^T, W_N^T)^T(t^n)) = (V_N^T, W_N^T)^T(t^n) + O(h)$$

y que

$$\begin{aligned} \beta_{n,h,N} &= \sqrt{\frac{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T(t^n))}{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T(t^{n+1})) - (\nabla I_{1,N})^T((V_N^T, W_N^T)^T(t^{n+1})) d_{3,N} h^3 + O(h^5)}} \\ &= 1 + \frac{1}{2} \frac{(\nabla I_{1,N})^T((V_N^T, W_N^T)^T(t^n)) d_{3,N}}{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T(t^n))} h^3 + O(h^5). \end{aligned}$$

Aquí se ha usado (1.17) así como el hecho de que CEMR es simétrico y, por lo tanto, $d_4 = 0$ [29]. De aquí se sigue el resultado. \square

Comentario 1.4.7 *Nótese que, cuando se integra una onda solitaria, considerando el Teorema 1.4.1 y la Observación 1.27, el segundo término entre corchetes en (1.49) tiende a cero cuando $N \rightarrow \infty$. Como consecuencia, el*

error local de truncación para CEMROP se comporta como el de CEMR excepto para términos en $O(h^5)$. A continuación, obsérvese que el Lema 1.3.2 se puede aplicar a CEMR y CEMROP. Por lo tanto, sus errores globales son también los mismos excepto para términos en $O(h^4)$. Por ello, el orden 4 queda justificado para los errores en $I_{1,N}$, $I_{2,N}$ y H_N .

Veamos a continuación lo que ocurre cuando se proyecta de un modo simétrico.

Teorema 1.4.8 *El error local de truncación correspondiente a la regla de punto medio exponencial de colocación simétricamente proyectado sobre $I_{1,N}$, cuando se aplica al sistema semidiscretizado (1.5), puede escribirse como*

$$h^3 \left[d_{3,N} - 2 \frac{(\nabla I_{1,N})^T ((V_N^T, W_N^T)^T) d_{3,N}}{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T)} \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} \right] + O(h^4), \quad (1.51)$$

donde $d_{3,N}$ es el término principal del error local de truncación correspondiente a CEMR.

Prueba. De (1.47) y (1.48), fácilmente se puede deducir que

$$\mu_{n,h,N} = - \frac{(\nabla I_{1,N})^T ((V_N^T, W_N^T)^T) d_{3,N}}{I_{1,N}((V_N^T, W_N^T)^T)} h^3 + O(h^4). \quad (1.52)$$

Por otra parte, de (1.47), el error local de truncación puede escribirse como

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^{n+1}) - \frac{1}{1 + \mu_{n,h,N}} \psi_h \left((1 - \mu_{n,h,N}) \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) \\ &= \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^{n+1}) - \psi_h \left(\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) \\ & \quad + \psi_h \left(\begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) - \psi_h \left((1 - \mu_{n,h,N}) \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right) \\ & \quad + \frac{\mu_{n,h,N}}{1 + \mu_{n,h,N}} \psi_h \left((1 - \mu_{n,h,N}) \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} (t^n) \right), \end{aligned} \quad (1.53)$$

donde ψ_h corresponde de nuevo a CEMR. A continuación, considerando la expresión (1.52), cada una de las últimas dos líneas son $\mu_{n,h,N} (V_N^T, W_N^T)^T (t^n) + O(h^4)$, de donde se sigue el resultado. \square

Comentario 1.4.9 *Obsérvese que, cuando se integra una onda solitaria, considerando el Teorema 1.4.1 y la Observación 1.27, el segundo término entre corchetes en (1.51) tiende a cero cuando $N \rightarrow \infty$. Por lo tanto, el error local de truncación para CEMRSP se comporta como el de CEMR. Este hecho, junto con la simetría de CEMRSP, implica que los Teoremas 1.4.1, 1.4.4 y las Observaciones 1.27, 1.4.5 también se aplican a CEMRSP. Por lo tanto el orden 4 queda justificado para los errores en $I_{1,N}$, $I_{2,N}$ y H_N .*

1.4.4 Implementación y resultados numéricos.

Como se vió en los preliminares, el sistema (1.5) es equivalente al (7) del capítulo 0, donde allí se consideran como incógnitas los coeficientes asociados a las diversas frecuencias. También hemos comprobado que es equivalente aplicar el método exponencial (17)-(18) sobre (7) o sobre (1.5), con L_N y g_N en (1.21). Sin embargo, desde el punto de vista computacional, es más barato integrar (7). Nótese que, para calcular las etapas de todos los métodos, se ha aplicado la iteración de punto fijo a la parte no lineal y no rígida del problema. En los métodos clásicos se resuelve un sistema lineal con la parte lineal y rígida en cada iteración. Cuando se considera el sistema (1.5), incluso llevando a cabo de una vez por todas al principio de la integración una factorización LU de la matriz L_N en (1.21) se necesitan $O(N^2)$ operaciones aritméticas en cada iteración para las factorizaciones progresiva y regresiva dado que A_N es llena. Sin embargo, cuando se considera el sistema (7), como la matriz D_N es diagonal, solo se necesitan $O(N)$ operaciones aritméticas para resolver el sistema. Es cierto que la evaluación de la parte no lineal es más costosa en el sistema (7) que en el sistema (1.5) pero la diferencia ahora es $O(N \log N)$ (debido al coste de la Transformada Rápida de Fourier) frente a $O(N)$. Por lo tanto, globalmente, es más barato integrar (7) que integrar (1.5). Con respecto a los métodos exponenciales, obsérvese que de nuevo, para el cálculo de las etapas, puede utilizarse la iteración de punto fijo ya que siendo rígida la matriz L ello no implica que $\{a_{ij}(hL)\}$ sean matrices rígidas. De hecho, $\{a_{ij}(hL)\}$ no son matrices rígidas dado que, en nuestro problema, los valores propios de L yacen en el eje imaginario y las funciones $a_{ij}(z)$ están acotadas en dicho eje imaginario para los métodos de Lawson y de colocación. En cuanto a la eficiencia computacional, incluso ignorando el coste del cálculo de la matriz exponencial y los coeficientes ma-

triciales (los cuales pueden ser calculados de una vez por todas al principio), multiplicar estas matrices por vectores en cada paso y en cada iteración resulta más caro cuando se considera (1.5) que con (7) dado que se necesitan $O(N^2)$ operaciones aritméticas para el primero y solo $O(N)$ operaciones aritméticas para el último a causa de la forma diagonal de las matrices en este caso.

En cuanto a la comparación entre métodos clásicos y exponenciales cuando se integra (7), nótese que cada iteración para calcular la etapa en el método clásico **MR** viene dada por

$$(I + i\frac{h}{2}D_N)K^{[m+1]} = C_N^n + \frac{h}{2}ir_N(K^{[m]}). \quad (1.54)$$

Despreciando el coste de calcular $(I + i\frac{h}{2}D_N)$ o su inversa (que puede hacerse de una vez por todas al principio y ser almacenado en un vector N -dimensional) y el coste de calcular $ir_N(K^{[m]})$ (que es el mismo para todos los métodos), cada iteración requiere 1 producto de vectores componente a componente, 1 producto de un escalar por un vector y 1 suma de vectores N -dimensionales. En cuanto a **CEMR**, la iteración para calcular la etapa es ahora

$$K^{[m+1]} = e^{-i\frac{h}{2}D_N}C_N^n + ha(-ihD_N)ir_N(K^{[m]}), \quad (1.55)$$

donde $a(z) = (e^{\frac{z}{2}} - 1)/z$. Despreciando una vez más el coste de calcular $e^{-i\frac{h}{2}D_N}$ y $ha(-ihD_N)$ (que pueden hacerse de una vez por todas al principio y ser almacenados en dos vectores N -dimensionales) y el coste de calcular $ir_N(K^{[m]})$, cada iteración requiere 2 productos de vectores componente a componente y 1 suma vectorial. Finalmente, la iteración para calcular la etapa en **LEMR** viene dada por

$$K^{[m+1]} = e^{-i\frac{h}{2}D_N}C_N^n + \frac{h}{2}ir_N(K^{[m]}), \quad (1.56)$$

para la cual, despreciando de nuevo el coste de calcular $e^{-i\frac{h}{2}D_N}$ y $ir_N(K^{[m]})$, cada iteración requiere 1 producto de vectores componente a componente, 1 producto de un escalar por un vector y 1 suma vectorial. No hay gran diferencia entre la computación requerida para cada iteración con los tres métodos, aunque los productos de vectores componente a componente son los más costosos entre todos los tipos de operaciones consideradas y por lo tanto

CEMR puede ser el más costoso por iteración. Por otra parte, a priori, no sabemos qué método requerirá menos o más iteraciones para converger. Para ser objetivos en la comparación, siempre hemos escogido C^n como iterante inicial. Una vez que la etapa se ha calculado, para avanzar un paso, obsérvese que **MR** viene dado por

$$C_N^{m+1} = C_N^m + h(-iD_N K + ir_N(K)),$$

que requiere 1 producto de vectores componente a componente, 1 producto de un escalar por un vector y 2 sumas vectoriales, mientras que para **CEMR**

$$C_N^{m+1} = e^{-hiD_N} C_N^m + hb(-ihD_N)ir_N(K), \quad b(z) = (e^z - 1)/z,$$

se requieren 2 productos de vectores componente a componente y 1 suma vectorial, del mismo modo que con **LEMR**, para el cual

$$C_N^{m+1} = e^{-hiD_N} C_N^m + he^{-\frac{h}{2}iD_N} ir_N(K),$$

se requieren 2 productos de vectores componente a componente y 1 suma vectorial.

De nuevo se tiene que los métodos exponenciales conllevan más productos de vectores componente a componente.

Para mostrar la comparación en términos de tiempo de CPU hemos integrado la discretización pseudoespectral de (1.4) correspondiente a la condición inicial

$$u(x, 0) = \operatorname{sech}(\sqrt{2}x/2)e^{i\frac{\pi}{2}},$$

la cual se corresponde con la onda solitaria. Se ha considerado el intervalo de integración $[-50, 250]$ e integrado hasta $t = 200$, con $N = 1024$ nodos espaciales.

La Figura 1.1 muestra el error en H_N y la norma discreta L^2 para MR. La Figura 1.2 muestra el mismo tipo de error para LEMR. Las Figuras 1.3 y 1.4 muestran los errores en $I_{1,N}, I_{2,N}, H_N$ y la norma discreta L^2 para CEMR. Las Figuras 1.5, 1.6 y 1.7 muestran los errores en $I_{2,N}, H_N$ y la norma discreta L^2 para CEMROP y CEMRSP. Se comprueba que existe orden 4 en todos los invariantes para todos los métodos. Dado que todos estos métodos son geométricos, el error en los invariantes no crece con el tiempo, como ocurre con otros métodos no geométricos [12, 19]. Finalmente, como ya se

	0.1	0.1/2	0.1/3	0.1/4
MR	12	10	9	8
LEMR	13	10	9	8
CEMR	11	9	8	7
CEMROP	11	9	8	7
CEMRSP	11	9	8	7

Tabla 1.1: Promedio del número de iteraciones requeridas para la iteración de punto fijo para cada método y diferentes valores de h

ha justificado aquí, en todos los métodos considerados el error en la norma discreta L^2 (ahora de segundo orden) crece linealmente con el tiempo.

A causa del mismo comportamiento a largo plazo, para comparar la eficiencia de todos los métodos, solo necesitamos integrar nuestro problema a corto plazo, por ejemplo, $t = 1$. Para la integración de problemas donde no hay una diferencia significativa en la dificultad de integración a medida que el tiempo crece (como es el caso de ondas solitarias), la implementación más apropiada es la de paso fijo. En tal caso, resulta natural calcular las matrices que aparecen en (1.54)-(1.55)-(1.56) como funciones de ihD_N de una vez por todas al principio. Para calcular $a(ihD_N)$ con alta precisión en (1.55) hemos tenido mucho cuidado incluso cuando el argumento de $a(z)$ es cero o muy pequeño. Hemos medido el tiempo requerido de CPU para todos los métodos y diferentes valores de h desde el momento en que esas matrices ya han sido calculadas. No se trata más que aportar objetividad a la comparación en términos de eficiencia para tiempos cada vez más largos dado que no se consideran los cálculos iniciales para poner en funcionamiento el método al ser estos despreciables.

Por otra parte, de cara a observar la rapidez de convergencia de la iteración de punto fijo para cada método hemos medido el promedio del número de iteraciones requeridas en los distintos pasos hasta $t = 1$ para varios valores de h . Utilizando como criterio de convergencia que la diferencia entre dos iterantes sucesivos sea menor que 10^{-15} en la norma discreta L^2 , se representan, para los diferentes métodos considerados, los diferentes resultados obtenidos en la Tabla 3.3.1.

Los errores en la norma discreta frente al tiempo de CPU se muestran en

la Figura 1.8. Con respecto al error en la norma discreta L^2 , podemos observar que solo CEMR y CEMROP son ligeramente mejores que MR. Esto es debido al hecho de que se requieren una o dos iteraciones menos en el primero para el cálculo de la etapa en cada paso aunque el error es ligeramente mayor para esos métodos para cada valor de h y porque también sabemos que cada iteración es un poco menos costosa. Con respecto a CEMRSP, es claro que el esfuerzo computacional para llevar a cabo la proyección simétrica es muy alto mientras que la ganancia en el tamaño del error es despreciable. (CEMROP no mejora en exactitud si bien el esfuerzo computacional es despreciable). Para LEMR, aunque el coste computacional es similar al de MR para cada valor del tamaño de paso, el tamaño del error es más grande. El hecho de que las constantes de error son más grandes para los métodos de Lawson ya ha sido establecido en la literatura [32]. Con respecto al error en el Hamiltoniano, MR es el más barato. Se pueden hacer observaciones análogas a las anteriores con la diferencia de que ahora, el tamaño de los errores en el invariante, para los métodos CEMR, CEMROP y CEMRSP se ha incrementado bastante con respecto a los errores con el método MR y son casi tan grandes como los del método LEMR. Por lo anterior, parece no merecer mucho la pena utilizar integradores exponenciales.

1.5 Métodos explícitos de Lawson.

En esta sección, en el intento de buscar eficiencia en los métodos exponenciales, consideraremos los métodos explícitos de Lawson. En concreto, consideraremos esquemas explícitos correspondientes a

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ d & d & 0 \\ \hline & \frac{2d-1}{2d} & \frac{1}{2d} \end{array}, \quad (1.57)$$

que tienen orden clásico 2 para cualquier valor real no nulo de d . Los correspondientes métodos exponenciales de Lawson basados en ellos tienen el siguiente término principal para el error local de truncación

$$\begin{aligned} d_3(t) = & \left(\frac{1}{6} - \frac{d}{4}\right)L^2g + \left(\frac{d}{2} - \frac{1}{3}\right)Lg'F + \left(\frac{1}{6} - \frac{d}{2}\right)g'LF \\ & + \frac{1}{6}g'g'F + \left(\frac{1}{6} - \frac{d}{4}\right)g''[F, F] + \frac{d}{4}g'L^2U. \end{aligned} \quad (1.58)$$

De cara a estudiar el error en $I_{1,N}$ con estos métodos cuando se integra el sistema (1.5), de nuevo hemos de considerar $(\nabla I_{1,N})^T d_{3,N}$.

Teorema 1.5.1 *Los métodos explícitos de Lawson, basados en esquemas (1.57), cuando se aplican al sistema semidiscretizado (1.5) como discretización espacial de (1.4), satisfacen*

$$(\nabla I_{1,N})^T (V_N^T, W_N^T)^T \cdot d_{3,N} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \frac{1-d}{4} \frac{d}{dt} \left[\int_a^b |u|^6 dx \right]. \quad (1.59)$$

Prueba. Haciendo los correspondientes cálculos,

$$\begin{aligned} (\nabla I_{1,N})^T L_N^2 g_N &= -\frac{b-a}{N} [(A_N^2 V_N)^T (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2) \cdot W_N \\ &\quad - (A_N^2 W_N)^T (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2) \cdot V_N], \end{aligned}$$

el cual es simplemente el término opuesto a $(\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N F_N$, de acuerdo con (1.23). Por otra parte,

$$\begin{aligned} (\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N^2 \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} &= -\frac{b-a}{N} [-(A_N^2 V_N)^T W_N \cdot (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2) \\ &\quad + (A_N^2 W_N)^T V_N \cdot (V_N \cdot^2 + W_N \cdot^2)], \end{aligned}$$

que coincide exactamente con $(\nabla I_{1,N})^T g'_N L_N F_N$ en (1.23). Observando los coeficientes de $L^2 g$, $g' L F$ y $g' L^2 U$ en (1.58), sucede que los correspondientes términos en $(\nabla I_{1,N})^T d_{3,N}$ se anulan. Por lo tanto, es suficiente considerar las expresiones (1.22), (1.24) y (1.25) multiplicadas por los correspondientes coeficientes para $L_N g'_N F_N$, $g'_N g'_N F_N$ and $g''_N [F_N, F_N]$ en (1.58). Tras hacer estos cálculos, aparece la siguiente expresión

$$\begin{aligned} &(\nabla I_{1,N})^T d_{3,N} \\ &= -\frac{b-a}{N} \frac{3}{2} (d-1) [(V_N \cdot^4 W_N)^T A_N V_N + 2(V_N \cdot^2 W_N \cdot^3)^T A_N V_N \\ &\quad - 2(V_N \cdot^3 W_N \cdot^2)^T A_N W_N - (V_N \cdot W_N \cdot^4)^T A_N W_N \\ &\quad - (V_N \cdot^5)^T A_N W_N + (A_N V_N)^T W_N \cdot^5] \\ &\rightarrow_{N \rightarrow \infty} -\frac{3}{2} (d-1) \int_a^b [v_{xx} (v^4 w + 2v^2 w^3 + w^5) \\ &\quad - w_{xx} (v w^4 + 2v^3 w^2 + v^5)] dx. \end{aligned}$$

Ahora, considerando la primera ecuación en (1.2) multiplicada por $(2v^3w^2 + vw^4 + v^5)$ y la segunda ecuación en (1.2) multiplicada por $(2v^2w^3 + v^4w + w^5)$, se sigue que

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{1,N})^T d_{3,N} \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} -\frac{3}{2}(d-1) \int_a^b [(w_t - (v^2 + w^2)v)(v^4w + 2v^2w^3 + w^5) \\
& \quad + (v_t + (v^2 + w^2)w)(vw^4 + 2v^3w^2 + v^5)] dx \\
& = -\frac{3}{2}(d-1) \int_a^b \left[\frac{1}{6} \frac{d}{dt} (v^6 + w^6) + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (v^2w^4 + w^2v^4) \right] dx \\
& = -\frac{1}{4}(d-1) \frac{d}{dt} \left(\int_a^b (v^6 + w^6 + 3v^2w^4 + 3w^2v^4) dx \right) \\
& = -\frac{d-1}{4} \frac{d}{dt} \left(\int_a^b |u|^6 dx \right).
\end{aligned}$$

y el teorema queda probado. \square

Comentario 1.5.2 *Obsérvese que el Teorema 1.5.1 implica que el método explícito de Lawson correspondiente a $d = 1$ muestra orden 3 para el error en $I_{1,N}$ para cualquier tipo de solución que se integre. Además, cuando se integra una onda solitaria (1.3), como $|u(x, t)| = \rho_\alpha(x - ct - x_0)$, $\int_{-\infty}^{\infty} |u(x, t)|^6 dx$ es independiente del tiempo. Por lo tanto, para intervalos $[a, b]$ suficientemente amplios y tiempos t no demasiado grandes, la integral en (1.59) también puede considerarse independiente del tiempo y, por lo tanto, queda justificado el orden 3 para el error en $I_{1,N}$ cuando se integra una onda solitaria, cualquiera que sea el valor de d .*

Veamos lo que ocurre con el error en $I_{2,N}$. El Lema 1.4.3 así como el siguiente serán de mucha utilidad.

Lema 1.5.3 *Bajo las mismas hipótesis del Lema 1.4.3, se tiene que*

$$\begin{aligned}
& \int_a^b [uu_x u_x^* u_{xxx}^* + u^* u_x^* u_x u_{xxx}] dx \\
& = - \int_a^b [u^* u_x^* u_{xx}^2 + uu_x u_{xx}^*] dx - \int_a^b [uu_x^* u_{xx} u_{xx}^* + u^* u_x u_{xx} u_{xx}^*] dx, \quad (1.60)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_a^b [u^2 u_x^* u_{xxxx}^* + u^{*2} u_x u_{xxxx}] dx \\
&= 3 \int_a^b [u u_x u_{xx}^{*2} + u^* u_x^* u_{xx}^2] dx + 2 \int_a^b [u u_x^* u_{xx} u_{xx}^* + u^* u_x u_{xx}^* u_{xx}] dx. \quad (1.61)
\end{aligned}$$

Prueba. (1.60) se prueba integrando por partes y considerando (1.29). De modo similar, (1.61) se prueba integrando dos veces por partes y considerando de nuevo (1.29). \square

Teorema 1.5.4 *Los métodos explícitos de Lawson, basados en esquemas (1.57), cuando se aplican a sistemas semidiscretizados (1.5) como discretización espacial para (1.4), satisfacen*

$$(\nabla I_{2,N})^T \cdot d_{3,N} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \frac{3(d-1)}{2} \int_a^b (u^2 u^* u_x u_x^{*2} + u u^{*2} u_x^2 u_x^*) dx. \quad (1.62)$$

Prueba. Haciendo los correspondientes cálculos,

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T L_N^2 g_N \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [v_x ((v^2 + w^2)v)_{xxxx} + w_x ((v^2 + w^2)w)_{xxxx}] dx, \\
& (\nabla I_{2,N})^T L_N^2 \begin{pmatrix} V_N \\ W_N \end{pmatrix} \\
& \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \int_a^b [-2w_x w w_{xx}^2 + 4w_x v w_{xx} v_{xx} - 6w_x w v_{xx}^2 - 2v_x v^3 (v^2 + w^2)^2 \\
& \quad + 4w_x w_{xx} (v^2 - w^2)(v^2 + w^2) - 8w_x v_{xx} v w (v^2 + w^2) \\
& \quad - 2w_x w^3 (v^2 + w^2)^2 - 2w_x v^2 w (v^2 + w^2)^2 - 2v_x v v_{xx}^2 \\
& \quad + 4v_x w v_{xx} w_{xx} - 6v_x v w_{xx}^2 + 4v_x v_{xx} (w^2 - v^2)(v^2 + w^2) \\
& \quad - 8v_x w_{xx} v w (v^2 + w^2) - 2v_x v w^2 (v^2 + w^2)^2] dx.
\end{aligned}$$

Considerando esto y (1.40)-(1.41)-(1.42)-(1.43), simplificando con Mathematica[®] mediante derivación en todas las expresiones integrales y utilizando que

$u = v + iw$, obtenemos que

$$\begin{aligned}
& (\nabla I_{2,N})^T \cdot d_{3,N} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} \\
& \frac{d}{4} \int_a^b (u^3 u^{*4} u_x + u^4 u^{*3} u_x^* + 2uu^{*2} u_x^2 u_x^* + 2u^2 u^* u_x u_x^{*2} \\
& \quad - 2u^2 u^{*2} u_x^* u_{xx} - 16u_x u_x^{*2} u_{xx} - 2u^* u_x^* u_{xx}^2 - 2u^2 u^{*2} u_x u_{xx}^* \\
& \quad - 16u_x^2 u_x^* u_{xx}^* - 4u^* u_x u_{xx} u_{xx}^* - 4uu_x^* u_{xx} u_{xx}^* - 2uu_x u_{xx}^{*2} \\
& \quad - 8u^* u_x u_x^* u_{xxx} - 8uu_x u_x^* u_{xxx} - 2u^{*2} u_x u_{xxx} - 2u^2 u_x^* u_{xxx}^*) dx \\
& - \frac{1}{12} \int_a^b (- u^3 u^{*4} u_x - u^4 u^{*3} u_x^* + 2u^{*3} u_x^3 + 20uu^{*2} u_x^2 u_x^* \\
& \quad + 20u^2 u^* u_x u_x^{*2} + 2u^3 u_x^3 + 4uu^{*3} u_x u_{xx} - 2u^2 u^{*2} u_x^* u_{xx} \\
& \quad - 32u_x u_x^{*2} u_{xx} - 4u^* u_x^* u_{xx}^2 - 2u^2 u^{*2} u_x u_{xx}^* + 4u^3 u^* u_x^* u_{xx}^* \\
& \quad - 32u_x^2 u_x^* u_{xx}^* - 8u^* u_x u_{xx} u_{xx}^* - 8uu_x^* u_{xx} u_{xx}^* - 4uu_x u_{xx}^{*2} \\
& \quad - 16u^* u_x u_x^* u_{xxx} - 16uu_x u_x^* u_{xxx} - 4u^{*2} u_x u_{xxx} - 4u^2 u_x^* u_{xxx}^*) dx.
\end{aligned}$$

En la primera integral, utilizando (1.28)-(1.29)-(1.60)-(1.61), algunos términos se anulan. Por otra parte, utilizando (1.31), el resto de términos se reducen a

$$6 \int_a^b [u^2 u^* u_x u_x^{*2} + u^{*2} u u_x^* u_x^2] dx.$$

Para la segunda integral, utilizando de nuevo (1.28)-(1.29)-(1.60)-(1.61), algunos términos se anulan. Los otros, utilizando (1.30) y (1.31), se reducen a

$$18 \int_a^b [u^2 u^* u_x u_x^{*2} + u^{*2} u u_x^* u_x^2] dx,$$

de donde se sigue el resultado. \square

Comentario 1.5.5 *Obsérvese que el Teorema 1.5.4 implica que el método explícito de Lawson con $d = 1$ muestra orden 3 para el error en $I_{2,N}$ cuando se integra cualquier solución suficientemente regular. Además, cuando se integra la onda solitaria (1.3), realizando los correspondientes cálculos,*

$$\int_{-\infty}^{\infty} [u^2 u^* u_x u_x^{*2} + u^{*2} u u_x^* u_x^2] dx = \int_{-\infty}^{\infty} [\rho_\alpha^3 \rho_\alpha' ((\rho_\alpha')^2 + \frac{c^2 \rho_\alpha^2}{4})] dx = 0. \quad (1.63)$$

Como en el comentario 1.5.2, la última igualdad proviene del hecho de que ρ_α es una función par, lo cual implica que el término entre paréntesis en

(1.63) es impar. Por lo tanto, para intervalos $[a, b]$ suficientemente amplios y valores de t no demasiado grandes, la integral en (1.62) también puede considerarse igual a cero y, por lo tanto, el orden 3 para el error en $I_{2,N}$ queda justificado cuando se integra una onda solitaria, cualquiera que sea el valor de d .

1.5.1 Resultados numéricos.

En esta subsección primero comprobaremos los resultados anteriores. Hemos integrado el mismo problema como en la Subsección 1.4.4 pero con el método explícito de Lawson con $d = 0.5$ en (1.57). (Insistimos en que resultados similares se obtienen con otros valores de d). La Figura 1.9 muestra el error en $I_{1,N}$ e $I_{2,N}$ donde claramente se observa orden 3. Nótese sin embargo que, del hecho de que el método no es geométrico, el error en ambas cantidades no permanece acotado sino que crece linealmente con el tiempo. No obstante fijémonos que, de los comentarios 1.5.2 y 1.5.5, se satisface (1.18) para la onda solitaria. Esto justifica que la norma discreta L^2 crezca linealmente con el tiempo con este método (en vez de cuadráticamente, como ocurre para métodos en general). Esto se observa en la Figura 1.10, donde también se manifiesta claramente orden 2. Por otra parte, como en la onda solitaria, $\delta H(u)$ es una combinación lineal de $\delta I_1(u)$ y $\delta I_2(u)$, se satisface (1.19), lo cual justifica el orden 3 para el error en el Hamiltoniano, como también se muestra en la Figura 1.10. De nuevo el error no permanece acotado sino que crece linealmente con el tiempo.

Para buscar un mejor comportamiento a largo plazo, hemos considerado el método explícito de Lawson ortogonalmente proyectado sobre $I_{1,N}$ (denotado por **ELEOP**). Este procedimiento, descrito de nuevo por (1.45) y (1.46), es muy barato, dado que es completamente explícito y requiere de pocos cálculos adicionales. Lo que resulta sorprendente es que, cuando se proyecta sobre $I_{1,N}$ estamos de hecho proyectando sobre $I_{2,N}$ también, como muestra la Figura 1.11, donde hemos tenido que tomar $N = 20000$ y $[a, b] = [-50, 5050]$ para ver con claridad la proyección. Considerando un argumento similar al del Teorema 1.4.6, el término principal del error local de truncamiento para el método explícito de Lawson ortogonalmente proyectado sobre $I_{1,N}$ es prácticamente el mismo que para el método Lawson mismo. Aunque no se muestra aquí, hemos comprobado numéricamente que las diferencias del

error en la norma discreta L^2 son despreciables. Para la diferencia

$$E_N(t^n) = \begin{pmatrix} V_N^n \\ W_N^n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} V_N(t^n) \\ W_N(t^n) \end{pmatrix},$$

ocurre que, para $j = 1, 2$,

$$\begin{aligned} 0 &= I_{j,N} \begin{pmatrix} V_N^n \\ W_N^n \end{pmatrix} - I_{j,N} \begin{pmatrix} V_N(t^n) \\ W_N(t^n) \end{pmatrix} \\ &= (\nabla I_{j,N})^T \begin{pmatrix} V_N(t^n) \\ W_N(t^n) \end{pmatrix} E_N(t^n) + E_N(t^n)^T \text{Hess}(I_{j,N}) E_N(t^n), \end{aligned}$$

implica que

$$(\nabla H_N)^T \begin{pmatrix} V_N(t^n) \\ W_N(t^n) \end{pmatrix} E_N(t^n) = O(h^4),$$

lo que justifica orden 4 para el error en el Hamiltoniano. Esto puede observarse en la Figura 1.11, donde ahora los errores no crecen con el tiempo sino que se mantienen acotados.

Finalmente, hemos medido la eficiencia computacional del método explícito de Lawson proyectado sobre $I_{1,N}$ frente a los métodos implícitos analizados en la Sección 1.4. Como puede observarse en la Figura 1.12, el último es el más eficiente de todos los métodos considerados.

1.6 Conclusión.

La conclusión principal a la que se llega en este capítulo es que, de entre los métodos de orden 2, y para la integración de ondas solitarias de la ecuación cúbica de Schrödinger, no parece merecer mucho la pena utilizar métodos exponenciales implícitos frente a los clásicos. Sin embargo, los métodos explícitos de Lawson proyectados ortogonalmente sobre su primer invariante sí suponen una notable mejoría sobre los métodos clásicos. El hecho de que, para los métodos de Lawson, proyectar sobre el primer invariante implique proyectar sobre el segundo invariante, será objeto de estudio en el capítulo 2 así como la extensión a métodos de orden superior.

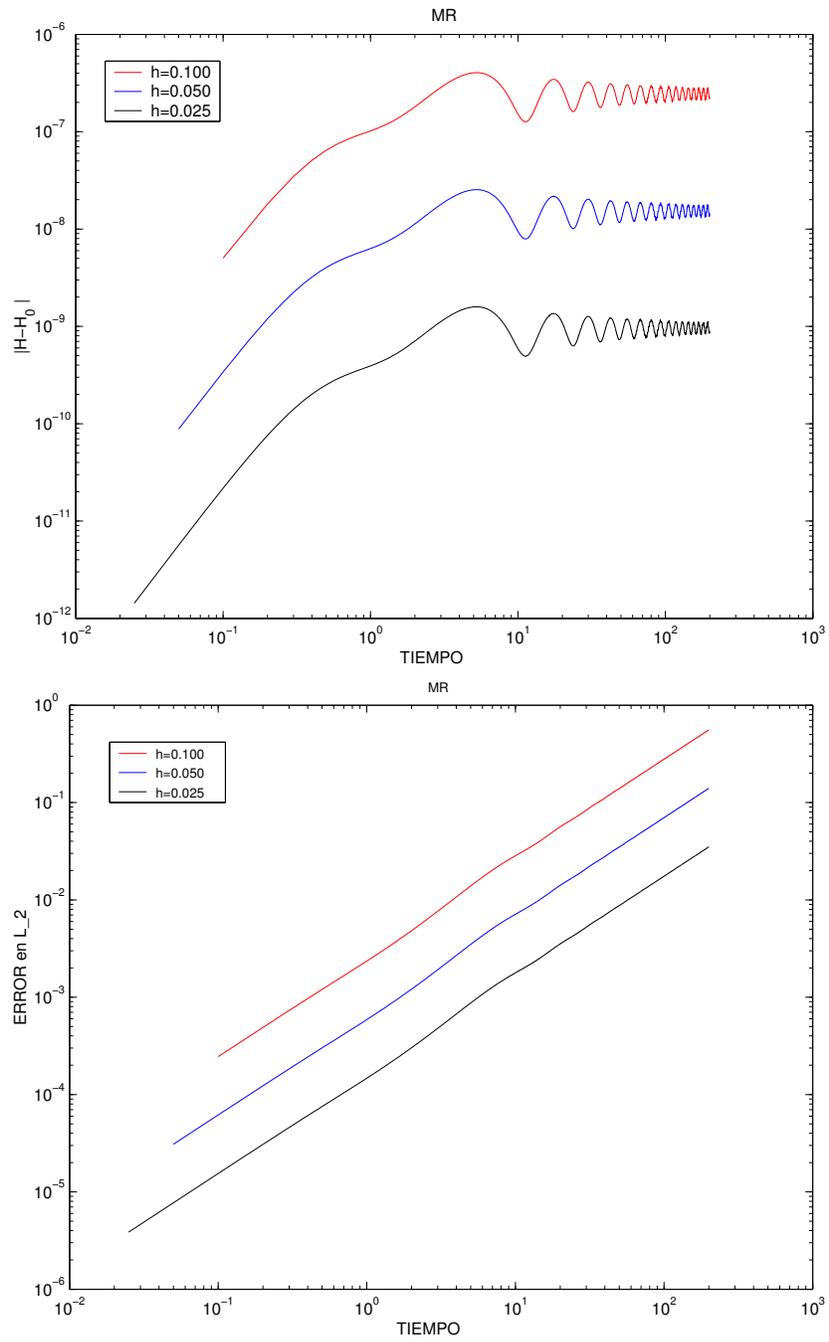


Figura 1.1: Errores en H_N y en la norma discreta L^2 para la regla de punto medio.

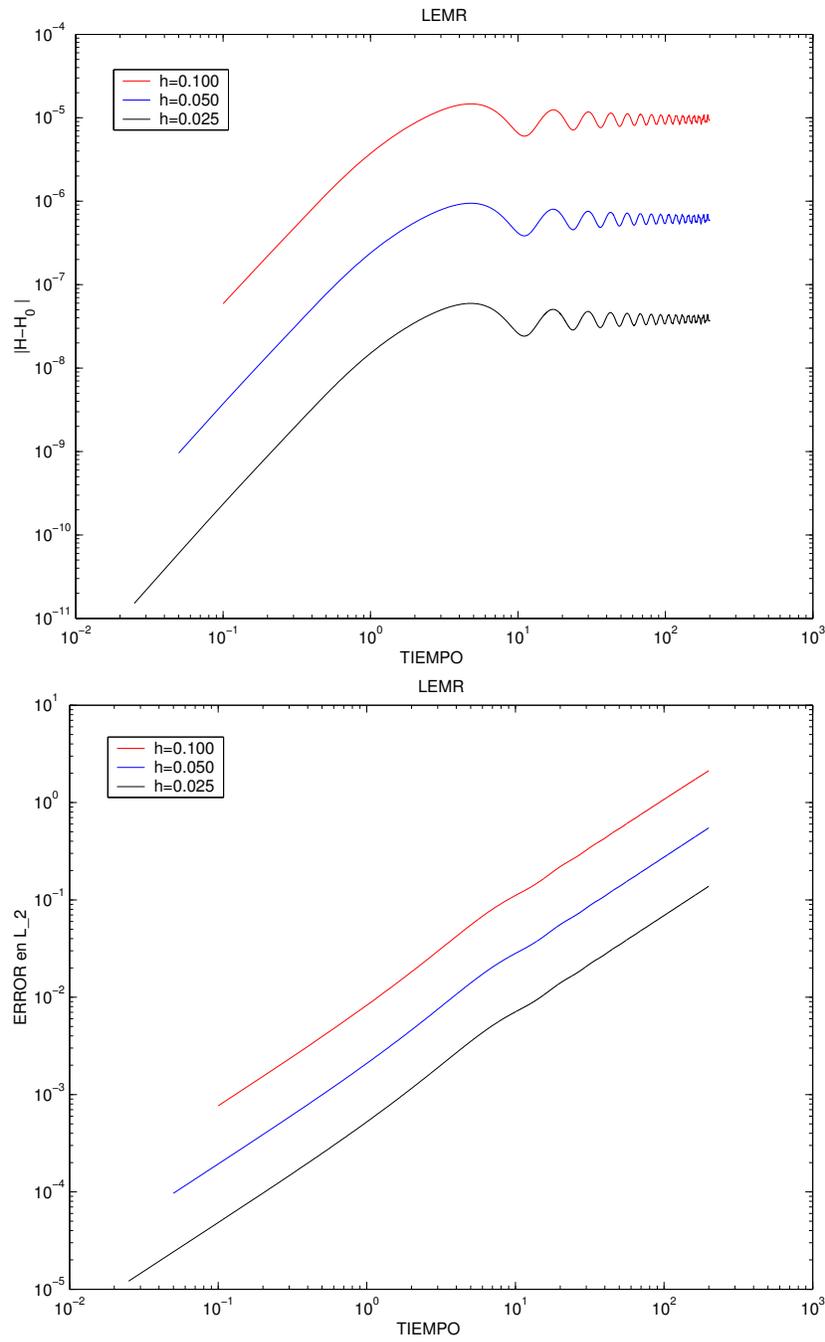


Figura 1.2: Errores en H_N y la norma discreta L^2 para la regla punto fijo exponencial de Lawson.

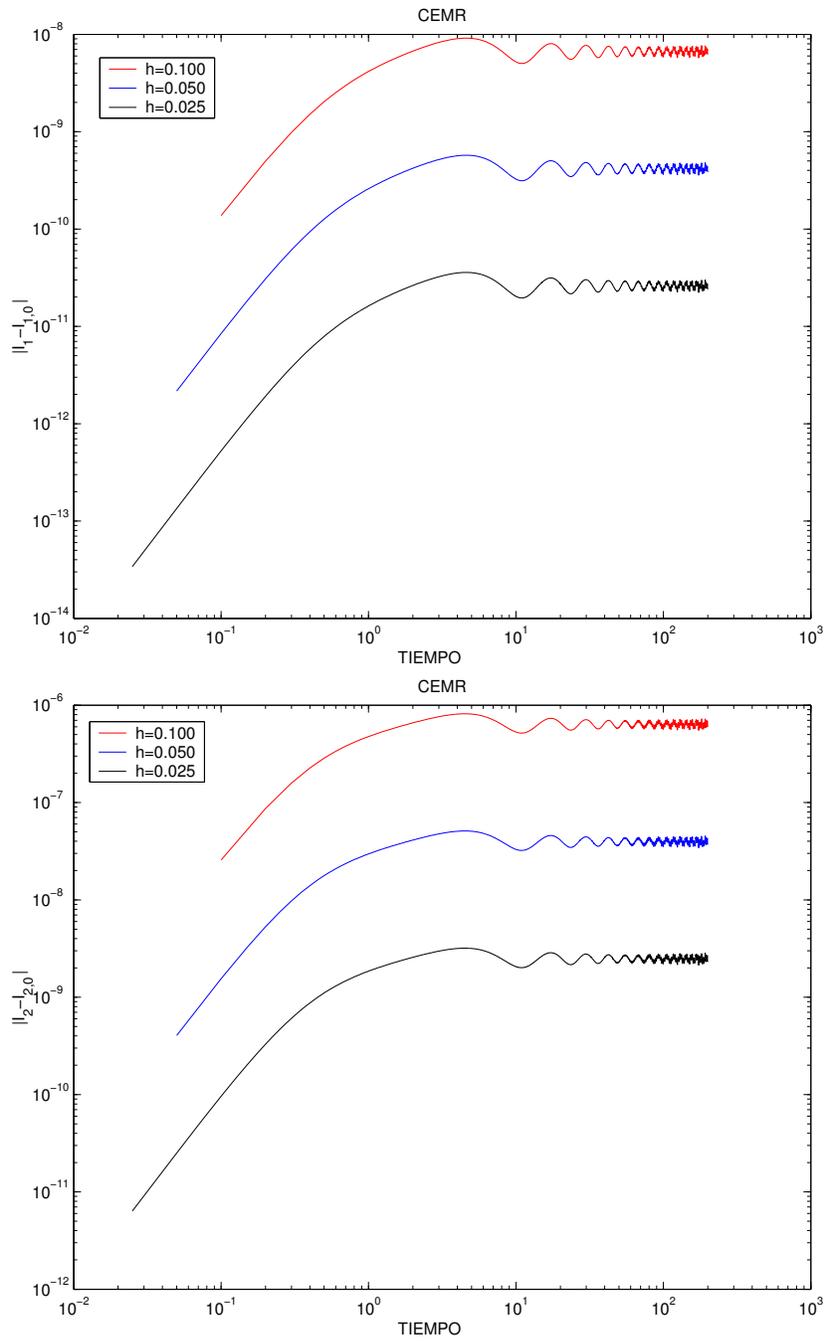


Figura 1.3: Errores en $I_{1,N}$ e $I_{2,N}$ para la regla de punto medio exponencial de colocación.

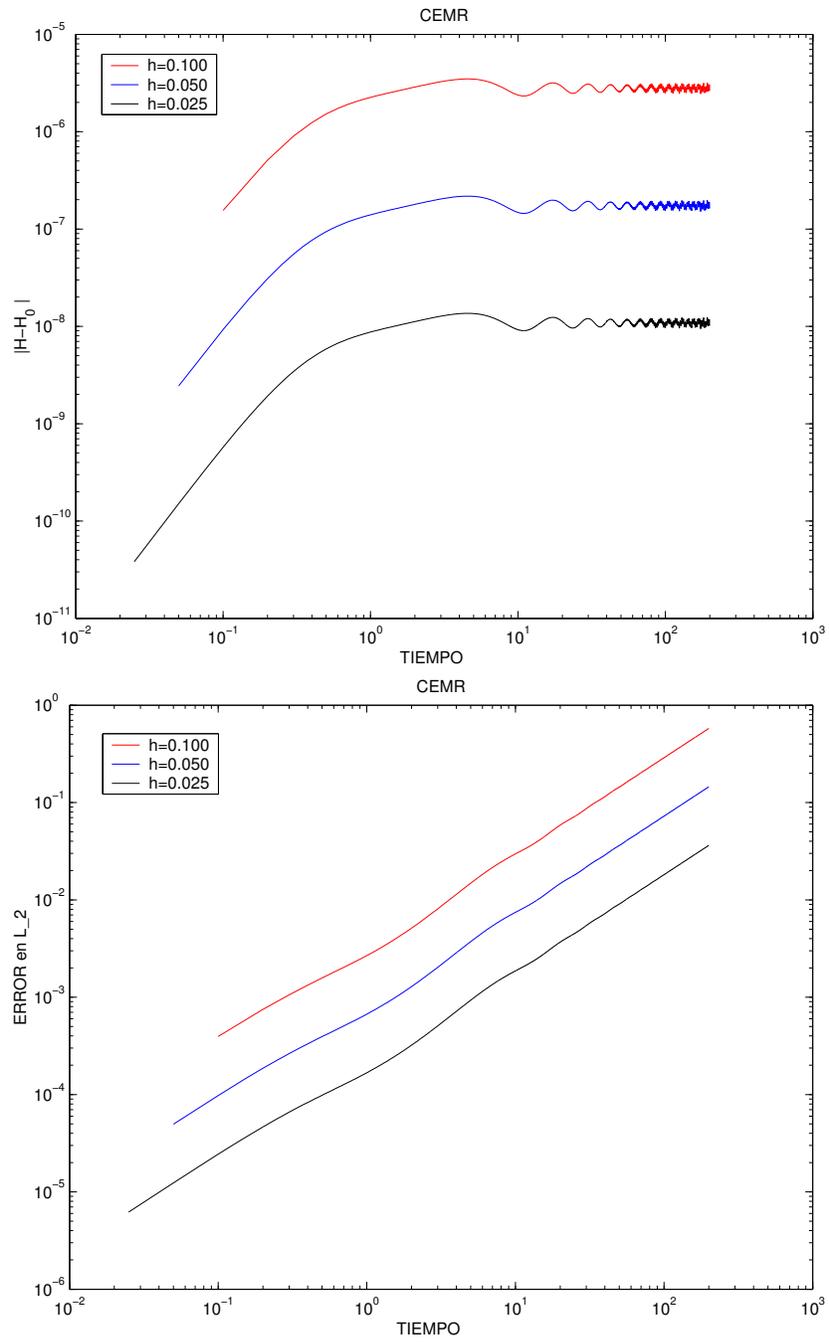


Figura 1.4: Errores en H_N y la norma discreta L^2 para la regla de punto medio exponencial de colocación.

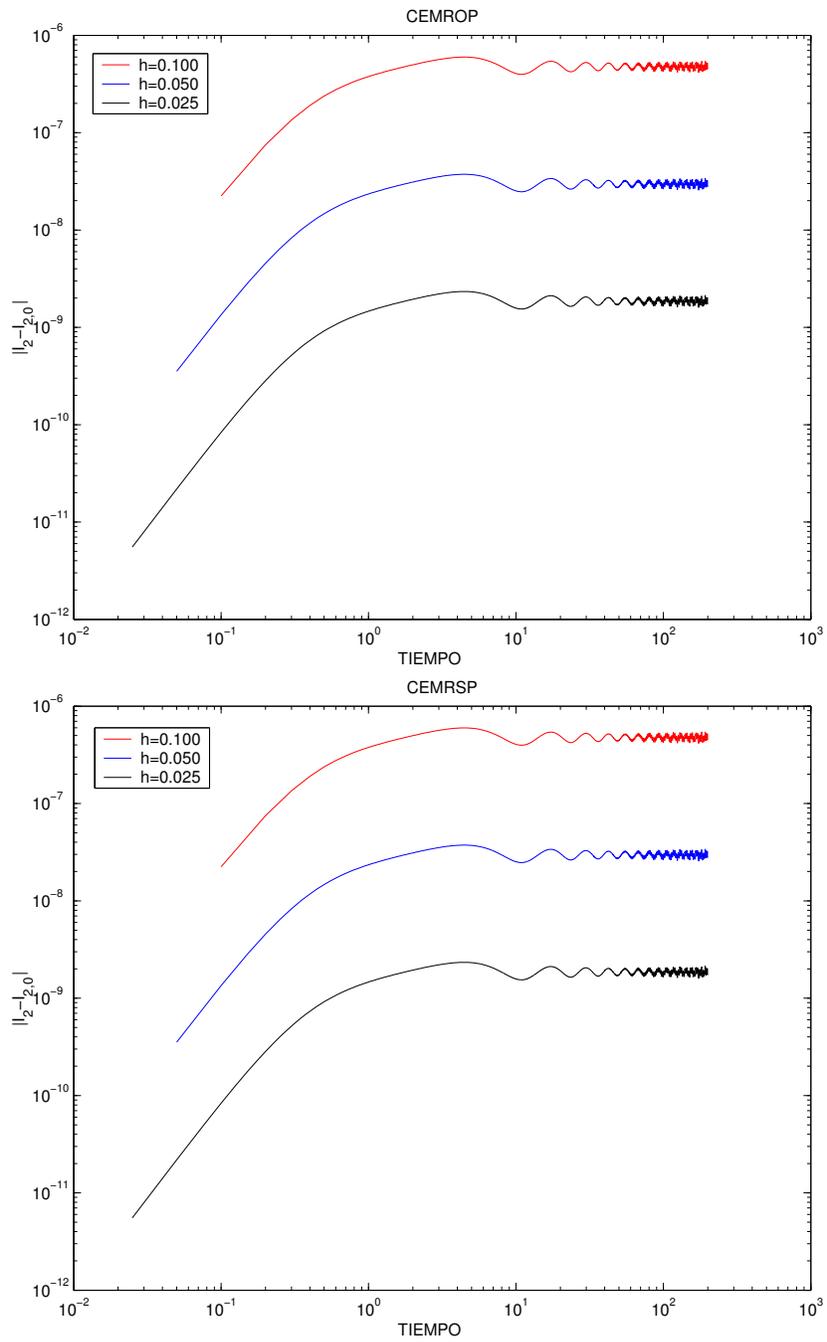


Figura 1.5: Errores en $I_{2,N}$ para CEMROP(arriba) y CEMRSP(abajo).

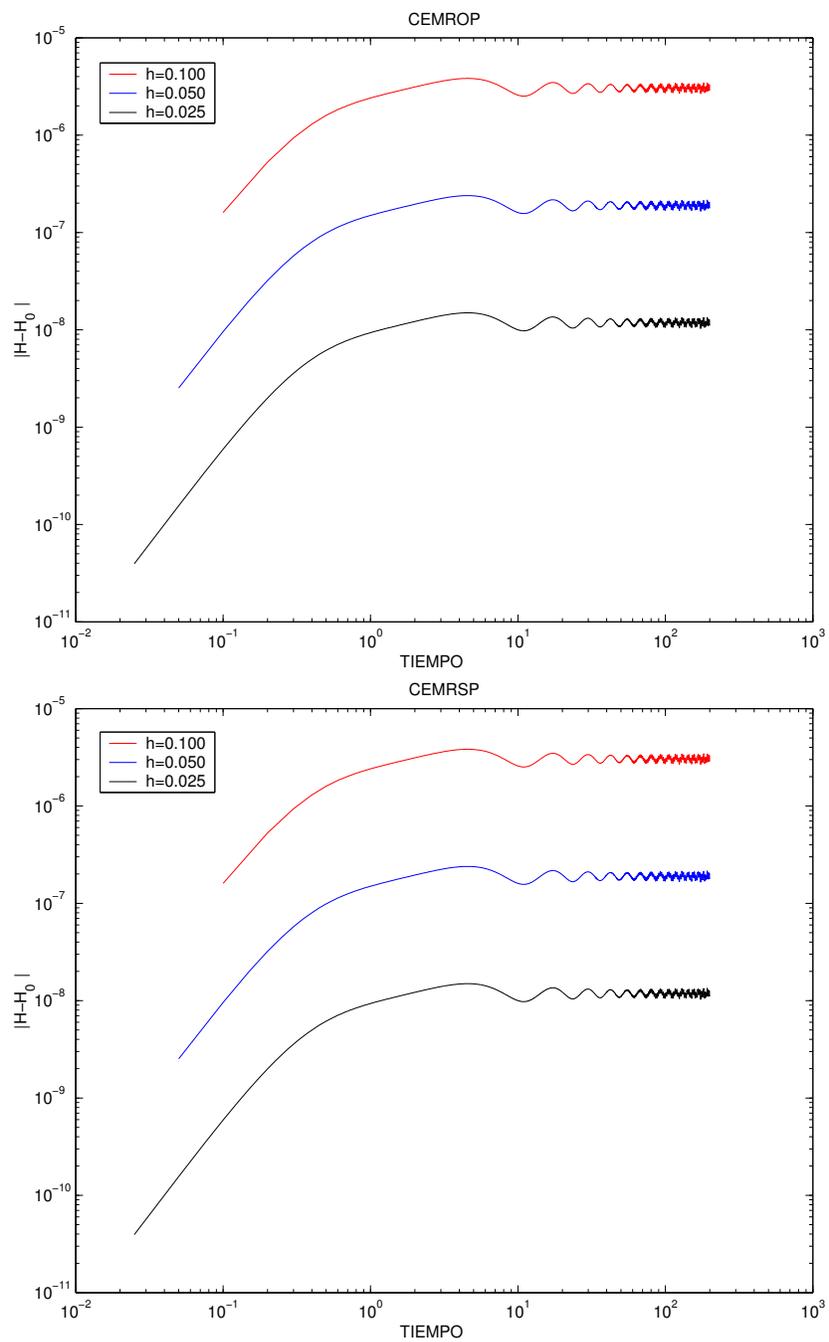


Figura 1.6: Errores en H_N para CEMROP(arriba) y CEMRSP(abajo).

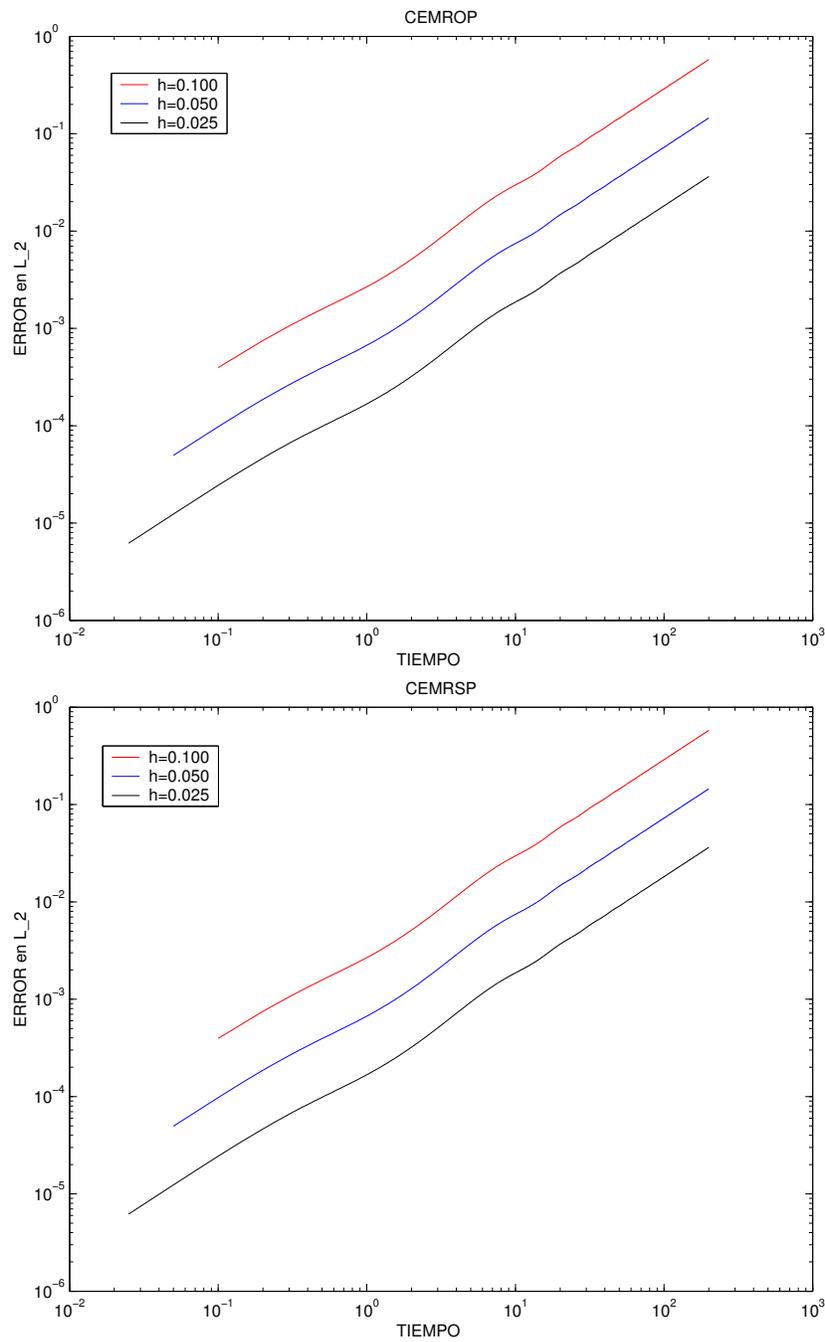


Figura 1.7: Errores en la norma discreta L^2 para CEMROP(arriba) y CEMRSP(abajo).

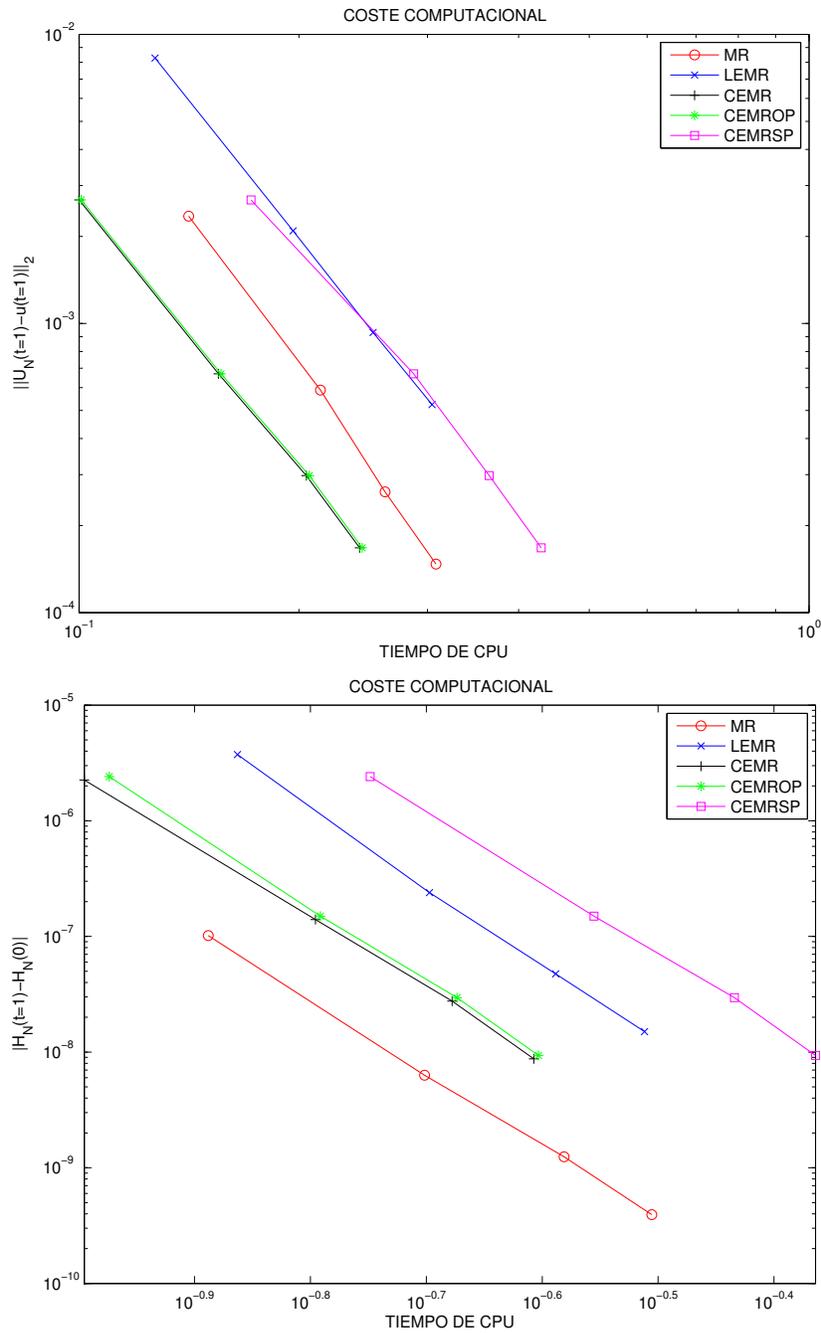


Figura 1.8: Comparación en eficiencia computacional para los errores en la norma discreta L^2 (arriba) y H_N (abajo).

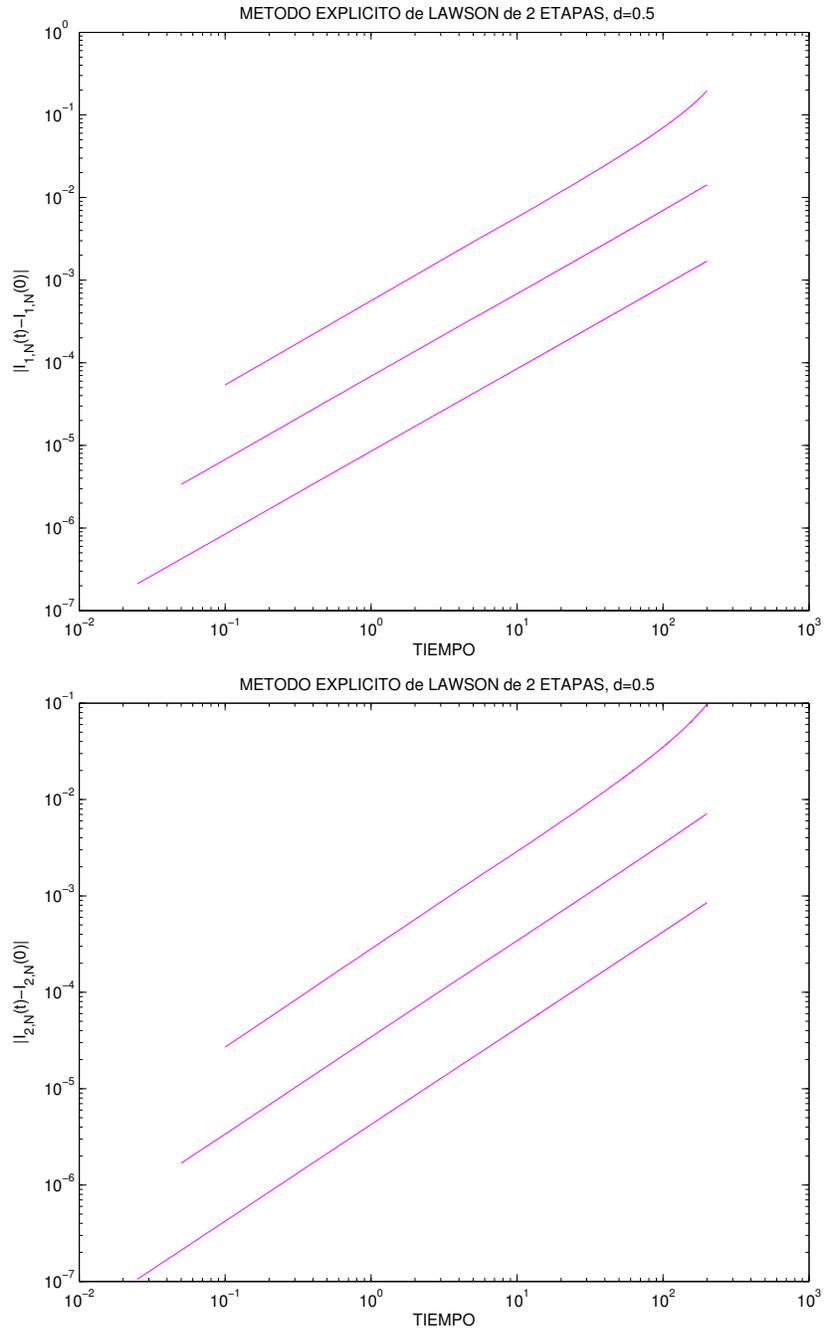


Figura 1.9: Errores en $I_{1,N}$ e $I_{2,N}$, con $h = 0.1, 0.05, 0.025$, para un método explícito de Lawson.

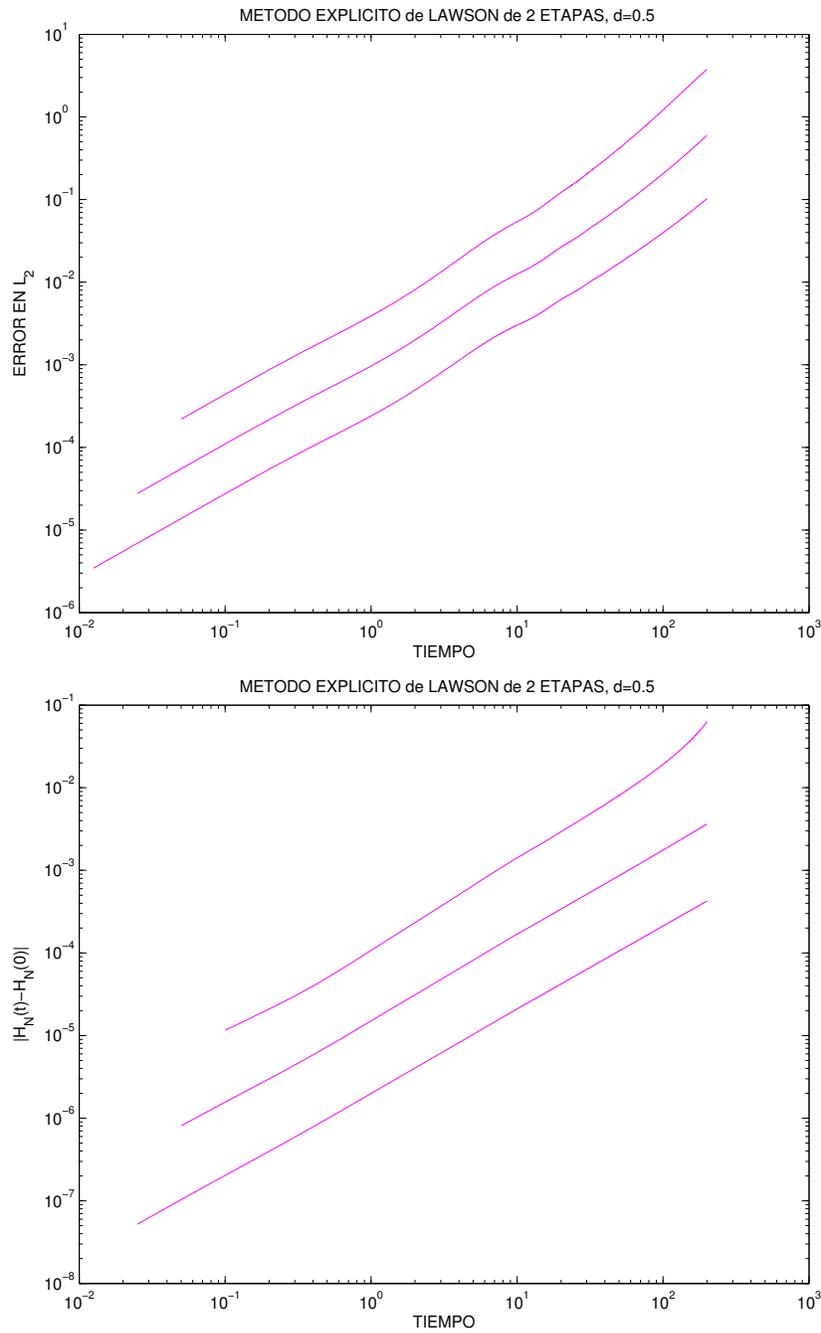


Figura 1.10: Errores en la norma discreta L^2 con $h = 0.05, 0.025, 0.0125$ y H_N con $h = 0.1, 0.05, 0.025$, para un método explícito de Lawson.

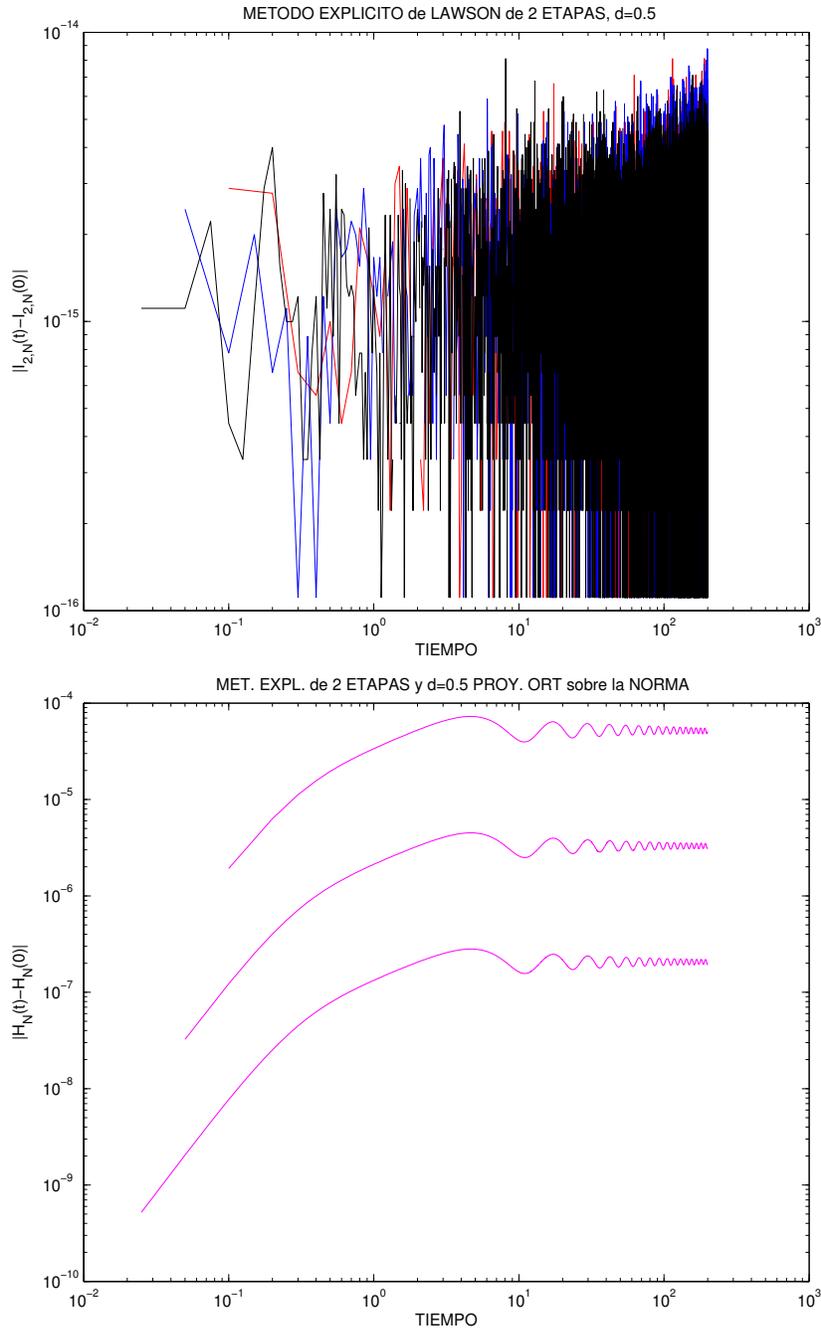


Figura 1.11: Errores en $I_{2,N}$ y H_N para el método explícito de Lawson ortogonalmente proyectado sobre $I_{1,N}$ con $h = 0.1, 0.05, 0.025$.

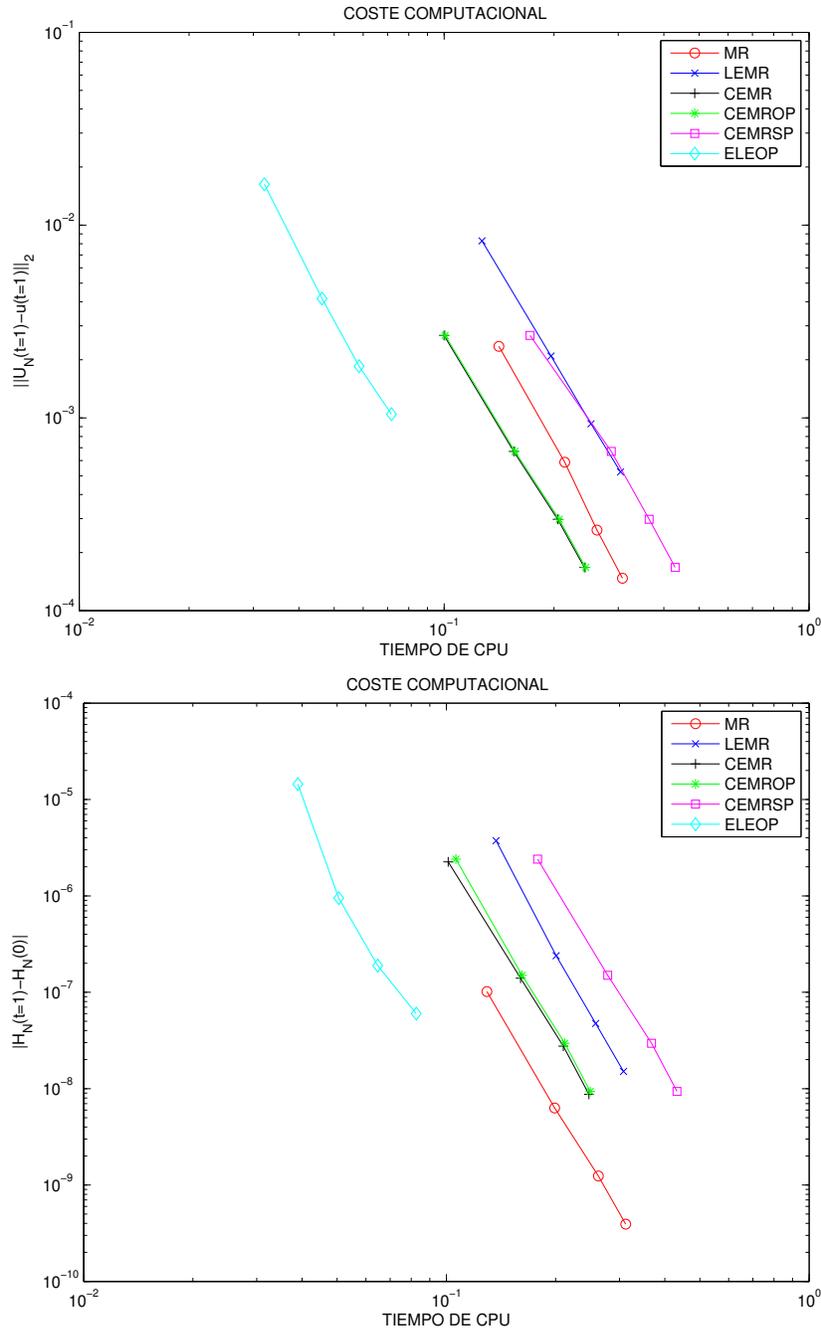


Figura 1.12: Comparación en eficiencia computacional para los errores en la norma discreta L^2 y H_N , incluyendo ELEOP.

Capítulo 2

Proyección de Métodos Lawson Explícitos.

2.1 Introducción.

El hecho de que los métodos exponenciales necesiten ser geométricos para conseguir un buen comportamiento a largo plazo en el tiempo condujo a la consideración de posibles integradores exponenciales simétricos/simpléticos [16, 25]. La conclusión allí fue que era posible construir integradores simétricos y exponenciales para la integración en el tiempo de la ecuación pero estos métodos, como parece razonable, son implícitos. De esta manera, la mayor ventaja de estos métodos exponenciales sobre los clásicos se pierde; que es que sea posible construir integradores que sean explícitos y estables para sistemas rígidos al mismo tiempo. De hecho hemos visto en el capítulo anterior que no parece compensar computacionalmente utilizar métodos exponenciales frente a los clásicos en ese caso. Sin embargo, teniendo en cuenta que la conservación de invariantes constituye una buena herramienta para lograr un buen comportamiento a largo plazo (al menos para ondas solitarias [19] y soluciones tipo estado fundamental [5], en este capítulo estudiamos con más detalle los métodos exponenciales de Lawson basados en los métodos

de Runge-Kutta explícitos tras proyectarlos sobre el invariante más simple: la norma I_1 . Como se ha visto en el capítulo anterior este procedimiento puede ser mucho más eficiente que la utilización de integradores clásicos o exponenciales geométricos pero implícitos, al menos para métodos de orden 2 y la integración de ondas solitarias de la ecuación cúbica de Schrödinger. En este capítulo justificamos con detalle que el barato proceso de proyectar sobre la norma I_1 implica también proyectar sobre el momento I_2 para la ecuación de Schrödinger más general y en varias dimensiones y para muchas más condiciones iniciales que las que corresponden a la onda solitaria, como se establece y se prueba más adelante (c.f. Teorema 2.3.8).

Por otra parte los métodos de splitting simétricos son una alternativa para integrar esta ecuación [9, 21, 27, 38, 45, 49]. También pueden ser considerados como métodos exponenciales en el sentido que, como se sugiere en [48], la ecuación de Schrödinger no lineal puede ser descompuesta en dos partes de tal modo que, cada una por separado, puede ser integrada exactamente. Además, estos métodos tienen la ventaja computacional de ser también explícitos y ofrecer un buen comportamiento a largo plazo [21]. Después, el objetivo consiste en comparar algunos métodos de Lawson proyectados basados en métodos Runge-Kutta clásicos ‘óptimos’ con algunos métodos de splitting simétricos ‘óptimos’. Los métodos de Lawson tienen, como máximo, orden rígido 1 de acuerdo con [31, 32]. Sin embargo, estaremos interesados en soluciones regulares en espacio y tiempo para las cuales la solución, y muchas derivadas espaciales, se pueden considerar nulas fuera de un dominio acotado. Otros análisis sobre métodos exponenciales para otro tipo de problemas [13, 14] y en el estudio de la reducción de orden en métodos clásicos [1, 2, 3, 4] nos lleva a conjeturar con garantías que, en tal caso, podemos conseguir un orden de aproximación tan alto como queramos con los métodos de Lawson (el orden clásico del método Runge-Kutta subyacente). Aunque no es un objetivo de esta tesis probar el hecho anteriormente mencionado sí es un hecho observado en los experimentos numéricos. Además, para las comparaciones numéricas con los métodos de splitting, primero nos centraremos en la solución de onda solitaria de la ecuación cúbica de Schrödinger, solo como un ejemplo en el que está asegurado que existe solución exacta y es estable [47] y donde, a causa de la conservación de I_1 e I_2 , se asegura un comportamiento favorable del crecimiento del error para el método proyectado de Lawson y los métodos de splitting de acuerdo con [19]. Seguidamente, consideraremos problemas bidimensionales correspondientes tanto a las soluciones

dispersiva y no dispersiva. Para estos problemas es importante considerar una implementación adaptativa y compararemos métodos de Lawson proyectados basados en procedimientos clásicos anidados con los sugeridos por [36] para métodos de splitting. Mencionar que, para ambos tipos de métodos, la implementación adaptativa no rompe la conservación de invariantes y, por lo tanto, las propiedades cualitativas se conservan. No es un objetivo de esta tesis probar o comprender, desde un punto de vista teórico, el comportamiento a largo plazo de los diferentes métodos para este problema aunque mostraremos nuestros descubrimientos numéricos.

El capítulo se estructura como sigue. La sección 2 se concentra en ofrecer hechos preliminares. La sección 3 está dedicada a probar que los métodos de Lawson con métodos Runge-Kutta como método subyacente y proyectados ortogonalmente sobre la norma resultan ser también proyectados sobre el invariante del momento lineal cuando las condiciones iniciales son, ‘digamos’, simétricas. En la sección 4 se corrobora numéricamente este hecho para diferentes tipos de soluciones y diferentes métodos. La comparación con los métodos de splitting para diferentes problemas con paso fijo y variable se muestran en la sección 5. Finalmente se establecen las principales conclusiones a favor de la claridad del capítulo.

2.2 Preliminares.

Consideraremos ahora el problema de valores iniciales dado por (1) donde f no depende explícitamente de \mathbf{x} y una condición inicial

$$\begin{aligned} u_t(\mathbf{x}, t) &= i(\mu\Delta u(\mathbf{x}, t) + f(|u(\mathbf{x}, t)|^2)u(\mathbf{x}, t)) \\ u(\mathbf{x}, 0) &= u_0(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.1}$$

para una función lo suficientemente regular f , $\mu \in \mathbb{R}$ y $u_0 \in H^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. (Los requerimientos precisos para f para poder asegurar que el problema tiene una única solución en $H^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ han sido minuciosamente estudiados en la literatura [23, 24, 35].)

Los invariantes mencionados en (3), (4) y (5) para la ecuación cúbica de

Schrödinger (2) se generalizan ahora a

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} (\mu |\nabla u|^2 - F(|u|^2)), \text{ con } F(\lambda) = \int_0^\lambda f(s) ds, \\
I_1 &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u|^2, \\
\mathbf{I}_2 &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \text{Im}(u \nabla u^*).
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Mencionar que H e I_1 son cantidades escalares mientras que \mathbf{I}_2 es un vector consistente en d invariantes.

Para la integración de (2.1), consideraremos métodos Runge-Kutta exponenciales de tipo Lawson [37] descritos en la sección 1.3 y que para nuestra ecuación concreta vienen dados, para cada paso h , mediante las expresiones

$$K_r = e^{ic_r h \mu \Delta} u_n + hi \sum_{j=1}^{r-1} \alpha_{rj} e^{i(c_r - c_j) h \mu \Delta} f(|K_j|^2) K_j, \quad r = 1, \dots, s \tag{2.3}$$

$$u_{n+1} = e^{ih \mu \Delta} u_n + hi \sum_{r=1}^s \beta_r e^{i(1-c_r) h \mu \Delta} f(|K_r|^2) K_r. \tag{2.4}$$

Asumiremos a lo largo de este capítulo que u_0 y f son tales que todos los términos que aparezcan en (2.3)-(2.4) pertenecen a $H^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ en cada paso.

2.3 Proyección ortogonal sobre la norma.

Para cualquier método numérico dado por $u_{n+1} = \Psi_h(u_n)$, podemos considerar la proyección ortogonal sobre I_1 . Proyectar sobre un invariante es, en general, un procedimiento implícito [30]. Sin embargo, a causa de la simpleza matemática de este invariante cuadrático, tenemos el siguiente resultado.

Teorema 2.3.1 *Para cualquier $g \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ tal que $I_1(g) \neq 0$, su proyección ortogonal sobre el invariante $I_1 = I_1^0$ está dado por $\sqrt{I_1^0/I_1(g)}g$.*

Prueba. Nótese que lo que se desea minimizar es $\|g - r\|_{L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})}^2$ para cualquier función $r \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ tal que $I_1(r) = I_1^0$. Pero

$$\|g - r\|_{L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})}^2 = \|g\|^2 + \|r\|^2 - 2\operatorname{Re}\left(\int gr^*\right) = \|g\|^2 - 2I_1^0 - 2\operatorname{Re}\left(\int gr^*\right).$$

Por lo tanto, el problema es equivalente a maximizar $\operatorname{Re}\left(\int gr^*\right)$. Teniendo en cuenta ahora que, por la desigualdad de Cauchy-Schwarz,

$$|\operatorname{Re}(gr^*)|^2 \leq \|g\|^2 \cdot \|r\|^2 = 4I_1(g)I_1^0,$$

y que la igualdad solo se produce si $r = \alpha g$ para α real, llegamos a la conclusión de que el máximo se alcanza en $r = \alpha g$ con α tal que

$$I_1^0 = I_1(r) = -\frac{1}{2}|\alpha|^2\|g\|^2 = |\alpha|^2 I_1(g)$$

y $\operatorname{Re}(\alpha \int |g|^2) > 0$. De lo anterior, es claro que α debe ser $\sqrt{I_1^0/I_1(g)}$. \square

De este modo, queda justificada la proyección ortogonal Ψ_h antes de discretizar en espacio, la cual viene dada por

$$\begin{aligned} \tilde{u}_0 &= u_0, \\ \tilde{u}_{n+1} &= \sqrt{\frac{I_1(\tilde{u}_n)}{I_1(\Psi_h(\tilde{u}_n))}} \Psi_h(\tilde{u}_n), \end{aligned} \quad (2.5)$$

Comentario 2.3.2 *Notemos la similitud de (2.5) con (1.45)-(1.46) en el capítulo anterior, donde se consideraba el integrador temporal del sistema ya discretizado en espacio y la proyección ortogonal sobre el entonces invariante $I_{1,N}$.*

Comentario 2.3.3 *Resulta interesante remarcar que esta proyección no relaja la consistencia del método dado que, siempre que Ψ_h tenga orden de consistencia q ,*

$$I_1(\Psi_h(\tilde{u}_n)) = I_1(\tilde{u}_n) + O(h^{q+1}).$$

Además, la constante en el resto depende de $I_1(\tilde{u}_n)$.

Prueba. Si denotamos por LTE a $\Psi_h(\tilde{u}_n) - \Phi_h(\tilde{u}_n)$, donde Φ_h es la solución exacta de (2.1) después de un tiempo h partiendo de \tilde{u}_n ,

$$\begin{aligned} \left| I_1(\Psi_h(\tilde{u}_n)) - I_1(\tilde{u}_n) \right| &= \left| \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} [|\Phi_h(\tilde{u}_n) + LTE|^2 - |\tilde{u}_n|^2] \right| \\ &\approx \left| \int_{\mathbb{R}^d} \operatorname{Re}(\Phi_h^*(\tilde{u}_n) \cdot LTE) \right| \leq [-2I_1(\tilde{u}_n)]^{\frac{1}{2}} \|LTE\|_{L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})}, \end{aligned}$$

donde la conservación de I_1 por Φ_h y la desigualdad de Cauchy-Schwarz han sido aplicadas. \square

El principal resultado de esta sección es que, con muchas condiciones iniciales, cuando se integra el problema (2.1) con métodos exponenciales explícitos de tipo Lawson, proyectar sobre I_1 implica proyectar sobre \mathbf{I}_2 .

Queremos hacer hincapié aquí en que, hasta donde sabemos, esto solo ocurre con los métodos de tipo Lawson. Aunque no se presenta aquí por motivos de brevedad, hemos comprobado que no ocurre con otros métodos tales como los exponenciales de colocación [16] u otros métodos no exponenciales como, por ejemplo, los métodos linealmente implícitos de Runge-Kutta.

Resulta interesante recalcar que el hecho de que \mathbf{I}_2 se conserve considerando el procedimiento (2.5) es equivalente al hecho de que

$$\mathbf{I}_2 \left(\sqrt{\frac{I_1(\tilde{u}_n)}{I_1(\Psi_h(\tilde{u}_n))}} \Psi_h(\tilde{u}_n) \right) = \mathbf{I}_2(\tilde{u}_n), \quad n \geq 0.$$

A causa del carácter cuadrático de \mathbf{I}_2 (2.2), es claro que esto es, de nuevo, equivalente a

$$I_1(\tilde{u}_n) \mathbf{I}_2(\Psi_h(\tilde{u}_n)) = I_1(\Psi_h(\tilde{u}_n)) \mathbf{I}_2(\tilde{u}_n).$$

De hecho, lo que ocurre es que existe una relación directa entre I_1 y \mathbf{I}_2 , la cual es la misma en todos los pasos para algunas condiciones iniciales. Los siguientes teoremas dan el resultado preciso.

Teorema 2.3.4 *Cualquiera que sea $u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{P}\cdot\mathbf{x}}$ con*

1. $g \in H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ una función simétrica con respecto a algún $\mathbf{x}^s \in \mathbb{R}^d$, i.e. $g(\mathbf{x}^s + \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}^s - \mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$,

$$2. \mathbf{p} = [p_1 \cdots p_d]^T \in \mathbb{R}^d \text{ y } \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = p_1 x_1 + \cdots + p_d x_d,$$

ocurre que

$$\mathbf{I}_2(u) = -\frac{I_1(u)}{2} \mathbf{p}.$$

Prueba. Notemos que, en nuestro caso,

$$I_1(u) = -\frac{1}{2} \int |u|^2 d\mathbf{x} = -\frac{1}{2} \int |g(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x},$$

y, dado el hecho que $\nabla u^*(\mathbf{x}) = e^{-\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}(\nabla g^*(\mathbf{x}) - \frac{i}{2}g^*(\mathbf{x})\mathbf{p})$,

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_2(u) &= -\frac{1}{2} \int \text{Im}(u \nabla u^*) d\mathbf{x} = -\frac{1}{2} \int \text{Im}(g(\mathbf{x}) \nabla g^*(\mathbf{x}) - \frac{i}{2}|g(\mathbf{x})|^2 \mathbf{p}) d\mathbf{x} \\ &= -\frac{1}{2} \int \text{Im}(g(\mathbf{x}) \nabla g^*(\mathbf{x})) d\mathbf{x} + \frac{\int |g(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}}{4} \mathbf{p}. \end{aligned}$$

Ahora, del hecho de que g sea simétrica respecto a $\mathbf{x}^s \in \mathbb{R}^d$ se deduce que $g \nabla g^*$ es antisimétrica con respecto al mismo $\mathbf{x}^s \in \mathbb{R}^d$, i.e. $(g \nabla g^*)(\mathbf{x}^s + \mathbf{x}) = -(g \nabla g^*)(\mathbf{x}^s - \mathbf{x})$ para cada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. Esto significa que el primer término en la expresión anterior se anula y por lo tanto se sigue el resultado. \square

Dado que los métodos exponenciales integran exactamente la parte lineal y rígida de la ecuación de Schrödinger, es importante incidir en cómo algunas condiciones iniciales evolucionan de acuerdo con la ecuación lineal continua de Schrödinger. El siguiente teorema establece este hecho.

Teorema 2.3.5 *Cualquiera que sea $u_0(\mathbf{x}) = g_0(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$ con $g_0 \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ siendo simétrico con respecto a $\mathbf{x}^s \in \mathbb{R}^d$, la solución de (2.1) con $f = 0$ satisface $u(\mathbf{x}, t) = g_{\mu t}(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$, con $g_{\mu t}(\mathbf{x})$ simétrico con respecto a $\mathbf{x}^s + \mu t \mathbf{p}$.*

Prueba. Considerando la transformada de Fourier con respecto a \mathbf{x} de (2.1) con $f = 0$, es claro que $\hat{u}_t(\omega, t) = -i\mu|\omega|^2 \hat{u}(\omega, t)$ [44], de donde $\hat{u}(\omega, t) = e^{-i|\omega|^2 \mu t} \hat{u}(\omega, 0)$. Ahora, sin pérdida de generalidad, asumiremos que $g_0 \in$

$L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. En caso de que no fuese así, el resultado se seguiría por densidad de este espacio en $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. Entonces,

$$\hat{u}(\omega, 0) = \int g_0(\mathbf{x}) e^{\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} = \hat{g}_0(\omega - \frac{1}{2}\mathbf{p}),$$

de donde, aplicando la transformada de Fourier inversa [44],

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{-i|\omega|^2 \mu t} \hat{g}_0(\omega - \frac{1}{2}\mathbf{p}) e^{i\omega\cdot\mathbf{x}} d\omega \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(\mathbf{v}) e^{i(\mathbf{v} + \frac{1}{2}\mathbf{p})\cdot(\mathbf{x} - \mu t(\mathbf{v} + \frac{1}{2}\mathbf{p}))} d\mathbf{v} = e^{\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} g_{\mu t}(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

donde, para la segunda igualdad, hemos considerado el cambio de variables $\mathbf{v} = \omega - \frac{1}{2}\mathbf{p}$ y donde

$$g_{\mu t}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(\mathbf{v}) e^{-i|\mathbf{v} + \frac{1}{2}\mathbf{p}|^2 \mu t} e^{i\mathbf{v}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{v}.$$

Ahora, comprobaremos que $g_{\mu t}(\mathbf{x}^s + \mu t\mathbf{p} + \mathbf{x}) = g_{\mu t}(\mathbf{x}^s + \mu t\mathbf{p} - \mathbf{x})$. Para ello, primero probaremos que $\hat{g}_0(\mathbf{u}) e^{i\mathbf{u}\cdot\mathbf{x}^s}$ es simétrico con respecto a $\mathbf{0}$. Obsérvese que

$$\begin{aligned} \hat{g}_0(\mathbf{u}) e^{i\mathbf{u}\cdot\mathbf{x}^s} &= \int g_0(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{u}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}^s)} d\mathbf{x} = \int g_0(\mathbf{x}^s + (\mathbf{x}^s - \mathbf{y})) e^{i\mathbf{u}\cdot(\mathbf{y} - \mathbf{x}^s)} d\mathbf{y} \\ &= \int g_0(\mathbf{y}) e^{i\mathbf{u}\cdot(\mathbf{y} - \mathbf{x}^s)} d\mathbf{y}, \end{aligned}$$

donde la segunda igualdad se deduce del cambio de variables $\mathbf{x} = 2\mathbf{x}^s - \mathbf{y}$ y la última del hecho que g_0 es simétrica con respecto a \mathbf{x}^s . La última expresión es claramente igual a la segunda excepto por el cambio de \mathbf{u} por $-\mathbf{u}$, de donde se sigue el resultado. A continuación, obsérvese que

$$\begin{aligned} g_{\mu t}(\mathbf{x}^s + \mu t\mathbf{p} + \mathbf{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(\mathbf{v}) e^{-i|\mathbf{v} + \frac{1}{2}\mathbf{p}|^2 \mu t} e^{i\mathbf{v}\cdot(\mathbf{x}^s + \mu t\mathbf{p} + \mathbf{x})} d\mathbf{v} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(\mathbf{v}) e^{-i(|\mathbf{v}|^2 + \frac{|\mathbf{p}|^2}{4}) \mu t} e^{i\mathbf{v}\cdot(\mathbf{x}^s + \mathbf{x})} d\mathbf{v}, \quad (2.6) \end{aligned}$$

la cual, tras el cambio de variables $\mathbf{u} = -\mathbf{v}$, puede ser escrito como

$$\begin{aligned} g_{\mu t}(\mathbf{x}^s + \mu t\mathbf{p} + \mathbf{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(-\mathbf{u}) e^{-i(|\mathbf{u}|^2 + \frac{|\mathbf{p}|^2}{4}) \mu t} e^{-i\mathbf{u}\cdot(\mathbf{x}^s + \mathbf{x})} d\mathbf{u} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \hat{g}_0(\mathbf{u}) e^{-i(|\mathbf{u}|^2 + \frac{|\mathbf{p}|^2}{4}) \mu t} e^{i\mathbf{u}\cdot(\mathbf{x}^s - \mathbf{x})} d\mathbf{u}, \end{aligned}$$

donde, para la última igualdad, la simetría de $\hat{g}_0(\mathbf{u})e^{i\mathbf{u}\cdot\mathbf{x}^s}$ con respecto a $\mathbf{0}$ ha sido utilizada. La última expresión es claramente igual a (2.6) excepto por el cambio de \mathbf{x} por $-\mathbf{x}$, a partir del cual el teorema queda probado. \square

Cuando se integra la ecuación de Schrödinger no lineal con un método explícito de Lawson, el resultado del teorema anterior también es cierto.

Teorema 2.3.6 *Cualquiera que sea u_0 como en el Teorema 2.3.5 y, cuando se integra (2.1) con un método explícito de Lawson (2.4), después de n pasos de tamaño h , la solución numérica u_n tiene la forma $u_n = g_{n,h}(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{P}\cdot\mathbf{x}}$, con $g_{n,h}(\mathbf{x})$ simétrica con respecto a $\mathbf{x}^s + \mu n h \mathbf{p}$.*

Prueba. Observemos primero que, en el primer paso, cada K_r en (2.3) tendrá la forma $K_r = g_0^r(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{P}\cdot\mathbf{x}}$, con $g_0^r(\mathbf{x})$ simétrica con respecto a $\mathbf{x}^s + c_r \mu h \mathbf{p}$. Notemos que $K_1 = e^{ic_1 \mu h \Delta} u_0$, el cual tiene la forma requerida a causa del Teorema 2.3.5. Inductivamente,

$$K_r = e^{ic_r \mu h \Delta} u_0 + hi \sum_{j=1}^{r-1} \alpha_{rj} e^{i(c_r - c_j) h \mu \Delta} f(|K_j|^2) K_j$$

tendrá la forma requerida sin más que utilizar de nuevo el Teorema 2.3.5 aplicado ahora a las correspondientes funciones $f(|K_j|^2)K_j$, cada una de las cuales es simétrica con respecto a $\mathbf{x}^s + c_j \mu h \mathbf{p}$ debido a la hipótesis de inducción. Finalmente,

$$u_1 = e^{ih\mu\Delta} u_0 + hi \sum_{r=1}^s \beta_r e^{i(1-c_r)h\mu\Delta} f(|K_r|^2) K_r$$

implica directamente que, a causa del Teorema 2.3.5, $u_1 = g_1(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{x}\cdot\mathbf{P}}$ con g_1 simétrica con respecto a $\mathbf{x}^s + \mu h \mathbf{p}$. Siguiendo el mismo argumento en sucesivos pasos, se sigue el resultado. \square

Considerando conjuntamente los Teoremas 2.3.4 y 2.3.6, es claro que existe una fuerte conexión entre los valores $I_1(u_n)$ y $I_2(u_n)$ en cada paso cuando se integra el problema (2.1) con un esquema explícito de Lawson. Además, el resultado anterior también es cierto para la proyección ortogonal del esquema explícito de Lawson, tal y como establece el siguiente teorema.

Teorema 2.3.7 *Cualquiera que sea u_0 como en el Teorema 2.3.5 y, cuando se integra (2.1) con un método explícito de Lawson ortogonalmente proyectado sobre I_1 como en (2.5), después de n pasos de tamaño h , la solución numérica \tilde{u}_n tiene la forma $\tilde{u}_n = \tilde{g}_{n,h}(\mathbf{x})e^{\frac{i}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$, con $\tilde{g}_{n,h}(\mathbf{x})$ simétrica con respecto a $\mathbf{x}^s + \mu nh\mathbf{p}$.*

Prueba. Es suficiente tener en cuenta que la proyección ortogonal sobre I_1 del método exponencial de Lawson solo difiere, paso a paso, de su versión no proyectada en una cantidad escalar que no depende de \mathbf{x} . Por lo tanto, el mismo argumento del Teorema 2.3.6 se puede llevar a cabo en cada etapa. \square

De lo anterior, surge de una manera directa el siguiente teorema.

Teorema 2.3.8 *Cualquiera que sea u_0 como en el Teorema 2.3.5 y, cuando se integra (2.1) con un método de Lawson explícito ortogonalmente proyectado sobre I_1 como en (2.5), también ocurre que \mathbf{I}_2 se conserva exactamente, i.e. $\mathbf{I}_2(\tilde{u}_n) = \mathbf{I}_2(u_0)$ para cada natural n .*

Prueba.

$$\mathbf{I}_2(\tilde{u}_n) = -\frac{I_1(\tilde{u}_n)}{2}\mathbf{p} = -\frac{I_1(u_0)}{2}\mathbf{p} = \mathbf{I}_2(u_0),$$

donde la segunda igualdad procede de la definición de proyección y la primera y tercera del Teorema 2.3.4 y el hecho de que puede ser aplicado para todo n gracias al Teorema 2.3.7. \square

2.4 Comprobación numérica.

Para corroborar numéricamente los resultados y, teniendo en cuenta que estamos trabajando con soluciones regulares, para la discretización espacial hemos considerado el método pseudoespectral en un intervalo suficientemente grande de modo que el error en espacio pueda considerarse despreciable.

Además, el error en I_2 se calcula aproximando este invariante de un modo pseudoespectral como se describe en [12] y en (15) de la Sección 1.2.

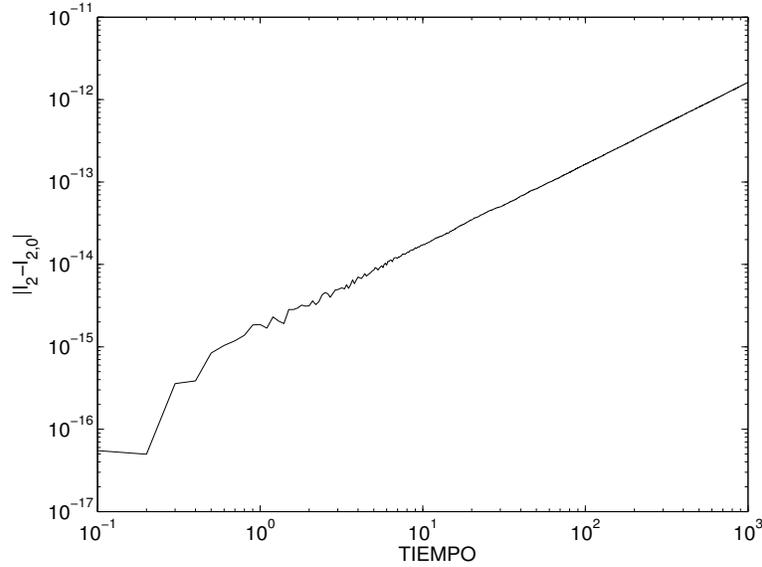


Figura 2.1: Error en I_2 con el método de Lawson proyectado (2.7) y condición inicial correspondiente a un 2-soliton, $h = 0.1$

En esta sección hemos integrado (2.1) con $\mu = 1$ pero hemos considerado diferentes ejemplos de f y condiciones iniciales. Además, hemos considerado dos tipos diferentes de integradores.

En primer lugar, hemos considerado el método de segundo orden de Runge-Kutta con tablero de Butcher dado por

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 1 & 1 & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
 \end{array} \quad (2.7)$$

Lo hemos implementado en un esquema de Lawson proyectado de acuerdo con el procedimiento descrito en (2.3)-(2.4)-(2.5) con $c_1 = 0, c_2 = 1, a_{21} = 1$ y $b_1 = b_2 = 1/2$. Además, la aproximación a I_1 en (2.5) se calcula a través de (1.6).

El primer ejemplo corresponde a $f(x) = 8x$ y la condición inicial co-

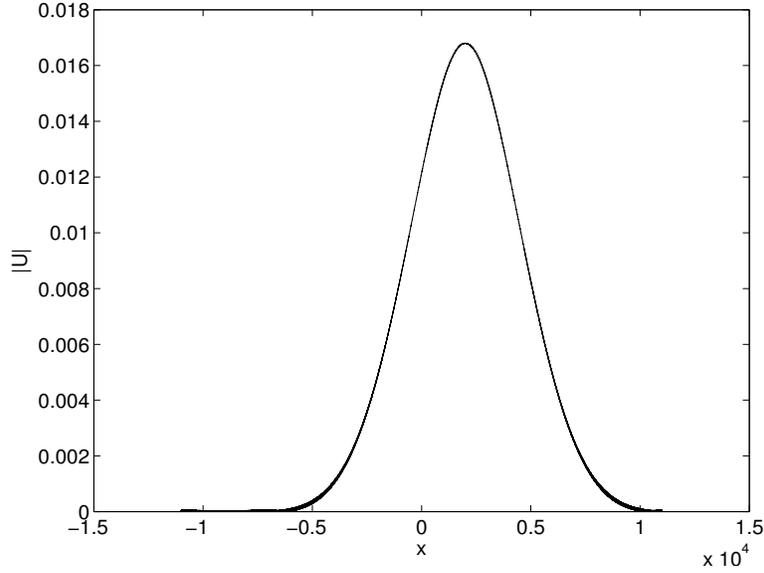


Figura 2.2: Modulo de la solución numérica en $t = 1000$ con el método de Lawson proyectado (2.7) y condición inicial $u_0(x) = e^{-x^2} e^{ix}$, $h = 0.1$

responde al estado fundamental de un 2- solitón [39].

$$u(x, t) = e^{it} \operatorname{sech}(x) \frac{1 + \frac{3}{4} \operatorname{sech}(x)^2 (e^{8it} - 1)}{1 - \frac{3}{4} \operatorname{sech}(x)^4 \sin(4t)^2}.$$

Corresponde a dos solitones que se aproximan y separan de modo oscilatorio en un dominio espacial que no cambia con el tiempo. En particular, hemos considerado $[a, b] = [-100, 100]$ y $N = 2^{13} = 8192$ para la discretización espacial y $h = 0.1$ para la integración en el tiempo. Notemos que la condición inicial $u_0(x) = \operatorname{sech}(x)$ satisface las hipótesis del Teorema 2.3.5 para $p = 0$ y $g_0(x) = \operatorname{sech}(x)$, la cual es una función par. La Figura 2.1 corrobora que el error en I_2 es despreciable dado que es del tamaño de los errores de redondeo. Observamos también que este error crece linealmente con el tiempo, lo cual es natural debido a la acumulación de errores muy pequeños en espacio a lo largo del tiempo de integración.

Como segundo ejemplo, hemos considerado $f(x) = x^2$ y condición inicial $u_0(x) = e^{-x^2} e^{ix}$, la cual satisface las hipótesis del Teorema 2.3.5 para $p = 2$ y $g_0(x) = e^{-x^2}$, la cual es de nuevo una función par. Numéricamente observa-

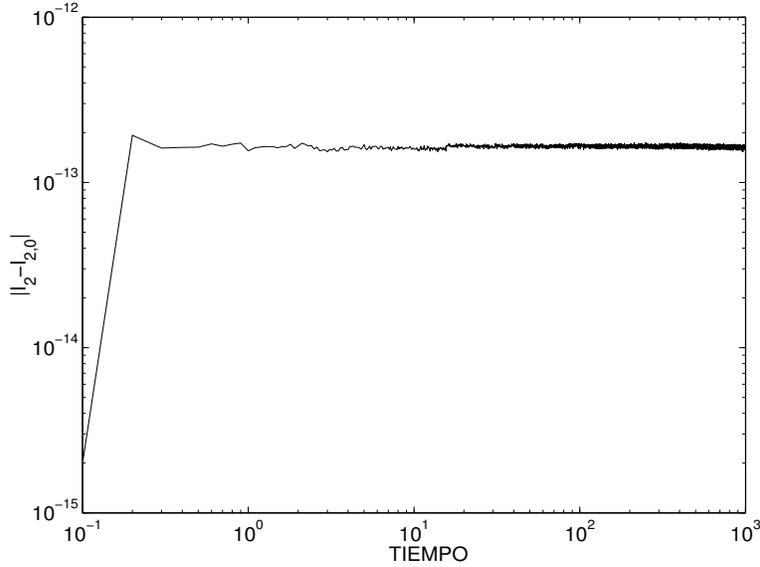


Figura 2.3: Error en I_2 con el método de Lawson proyectado (2.7) y $u_0(x) = e^{-x^2}e^{ix}$, $h = 0.1$

mos que la solución de este problema disminuye en módulo pero extiende su dominio con el tiempo. De hecho, mostramos en la Figura 2.2 el módulo de la solución numérica en $t = 1000$ cuando se considera $[a, b] = [-11000, 11000]$, $N = 2^{17} = 262144$ y $h = 0.1$. Dado que $p = 2$ el promedio espacial de la solución se mueve hacia la derecha con velocidad 2 [10], lo que también puede ser observado en la misma figura. El error en I_2 se muestra en la Figura 2.3 y puede, de nuevo, ser considerada como despreciable, lo cual corrobora el resultado de la sección previa. Observamos ahora que el error no muestra una tendencia como en la Figura 2.1, lo cual no es extraño dada la evolución del módulo de la solución que ahora decrece con el tiempo.

Para mostrar que la condición de la simetría con respecto a algún punto es necesaria para que el error en I_2 se anule, hemos integrado el mismo problema con la condición inicial

$$u_0(x) = (x + 1)e^{-x^2}e^{ix},$$

para la cual $g_0(x) = (x + 1)e^{-x^2}$ no es simétrica respecto a ningún $x^* \in \mathbb{R}$. El error en I_2 se muestra en la Figura 2.4 donde se observa claramente que el

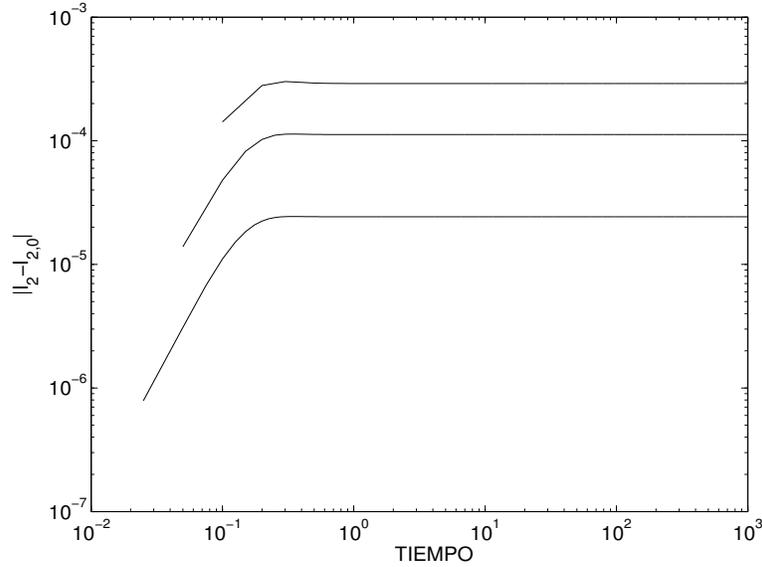


Figura 2.4: Error en I_2 con el método de Lawson proyectado (2.7) and $u_0(x) = (x + 1)e^{-x^2}e^{ix}$, $h = 0.1$ (arriba), $h = 0.05$ (medio), $h = 0.025$ (abajo)

error ya no se anula. La solución numérica a tiempo $t = 1000$ se representa en la Figura 2.5 para $h = 0.05$.

A continuación, comprobaremos que la anulación en el error de I_2 también ocurre para métodos de orden superior. Para ello, consideramos el método de Lawson basado en el método clásico de orden 4 de Runge-Kutta:

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
 \hline
 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array} . \tag{2.8}$$

Hemos tomado $f(x) = x$ y, como condición inicial, la correspondiente a la onda solitaria

$$u(x, t) = \operatorname{sech}(\sqrt{2}(x - t)/2)e^{i[\frac{1}{2}(x-t) + \frac{3}{4}t]}, \tag{2.9}$$

la cual es solución de la ecuación. El error en I_2 se muestra en la Figura 2.6 para tiempos $t = 1, 2, \dots, 1000$ considerando $[a, b] = [-50, 1050]$, $N =$

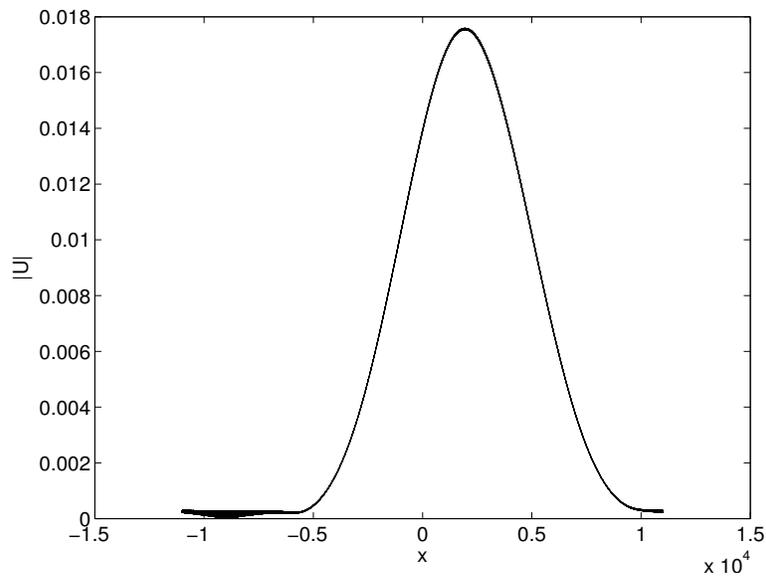


Figura 2.5: Módulo de la solución numérica en $t = 1000$ con el método de Lawson proyectado (2.7) y condición inicial $u_0(x) = (x + 1)e^{-x^2} e^{ix}$, $h = 0.05$

$2^{15} = 32768$ para la discretización en espacio y $h = 0.05$ para la integración en el tiempo. De nuevo los resultados de la Sección 2 son corroborados. Obviamente la hipótesis del Teorema 2.3.5 se satisface para la correspondiente condición inicial, para la cual $p = 1$ y $g_0(x)$ es par (simétrica con respecto a 0 para $d = 1$). Una tendencia lineal se observa en el error máximo en este ejemplo desde 10^2 hasta 10^3 , el cual es, de nuevo, natural a causa de la acumulación de errores pequeños en la discretización espacial y la forma de la solución. (Creemos que la tendencia lineal no está tan clara como lo está en la Figura 2.1 a causa de que el intervalo espacial donde la solución no es muy pequeña se está moviendo hacia la derecha.)

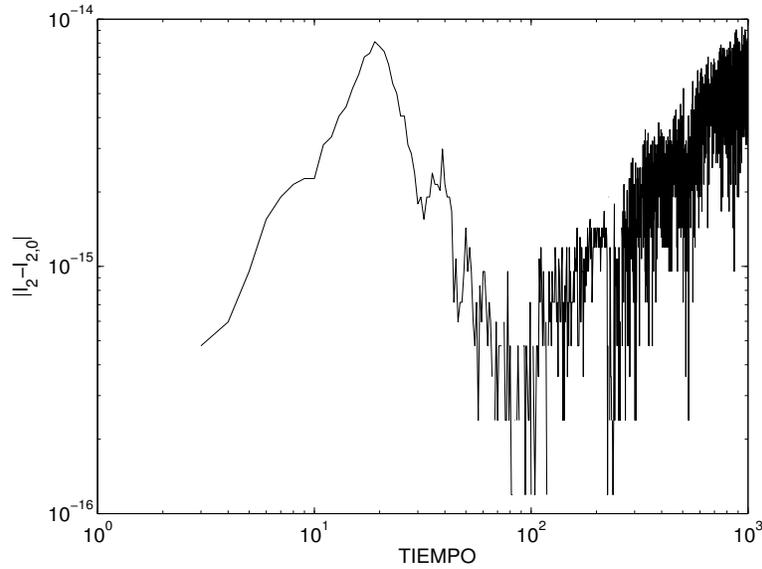


Figura 2.6: Error en I_2 con el método proyectado de Lawson basado en el método de Runge-Kutta de orden 4 y condición inicial correspondiente a una onda solitaria, $h = 0.05$

2.5 Comparación numérica con métodos de splitting.

En esta sección el objetivo es ver, hasta qué punto, los sugeridos métodos explícitos de Lawson proyectados pueden ofrecer un procedimiento eficiente para integrar la ecuación de Schrödinger no lineal frente a otros métodos de la literatura.

Sus mayores competidores son los métodos de splitting. De acuerdo con la observación hecha en [48], y según hemos comentado en la Sección 2.2 de los preliminares, los dos problemas en los cuales (2.1) puede ser descompuesta

$$u_t = i\Delta u, \quad u_t = if(|u|^2)u, \quad (2.10)$$

pueden fácilmente ser resueltos de un modo exacto: el primero, como se ha hecho en métodos exponenciales ya sugeridos, considerando la exponencial de una matriz diagonal constante después de haber aplicado la discretización

pseudoespectral. El segundo, simplemente por el hecho de que esta ecuación deja $|u|$ invariante y, por lo tanto, puede ser resuelto calculando también, la exponencial de una matriz diagonal constante. De este modo se obtiene un integrador explícito y estable. Por otra parte, las dos ecuaciones de (2.10) también tienen I_1 e I_2 como cantidades invariantes (con la misma prueba como la dada para (2.1) en [47]), lo cual implica que los métodos de splitting también conservan esas dos cantidades cuando se integra (2.1).

Hemos implementado los métodos en MATLAB de modo vectorial y trabajando principalmente en el espacio de los coeficientes de Fourier aproximados de modo que, los coeficientes de Fourier aproximados de $e^{i\alpha\Delta}u$ para el escalar α y $u \in H^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ (el cual aparece en (2.3)-(2.4) y con los métodos de splitting) son fácilmente calculados a partir de los coeficientes de Fourier aproximados de u . Obsérvese que, por ejemplo, en un problema unidimensional y considerando un intervalo suficientemente ancho $[a, b]$, y $N = 2M$, cuando

$$u \approx \sum_{j=-M}^{M-1} c_j e^{2\pi i j \frac{x-a}{b-a}},$$

$$e^{i\alpha\Delta}u \approx \sum_{j=-M}^{M-1} c_j e^{-i\alpha j^2 (\frac{2\pi}{b-a})^2} e^{2\pi i j \frac{x-a}{b-a}},$$

y por lo tanto, los correspondientes coeficientes de Fourier aproximados de $e^{i\alpha\Delta}u$ son únicamente multiplicaciones punto a punto de $\{c_j\}$ con $\{e^{-i\alpha j^2 (\frac{2\pi}{b-a})^2}\}$. (En dos dimensiones, ocurre algo similar). Además, las exponenciales se calculan de una vez por todas al inicio y no se calculan en cada paso. Nótese que la parte más costosa del coste computacional en ambos tipos de métodos provienen de los cálculos de FFT y su inversa, lo cual es necesario en el espacio de los coeficientes de Fourier aproximados a través de la pseudodiscretización en espacio cada vez que f tiene que ser calculada. De hecho, la razón para trabajar en el espacio discretizado con coeficientes aproximados en vez de los valores de la solución es que, con los métodos de Lawson (2.3)-(2.4), hay más evaluaciones del tipo $e^{i\alpha\Delta}u$ que evaluaciones de f . (Trabajar con valores numéricos de la solución habría implicado utilizar FFT y su inversa para cada una de las exponenciales, lo cual habría sido más caro).

Por otra parte, para los métodos de splitting, hemos reducido en todo lo posible el número de operaciones concatenando pasos consecutivos.

También nos gustaría señalar aquí que para la mayoría de los métodos linealmente implícitos de la literatura se requeriría resolver un sistema lineal en cada paso donde la matriz no sería diagonal sino llena de elementos no nulos fuera de la diagonal. Esto es debido a que muchas veces al Jacobiano de la discretización de $f(|u|^2)u$, y no solo de Δ , es parte de la matriz que determina el sistema lineal que se ha de resolver. Esta es una de las razones por las que ese tipo de métodos son menos competitivos que el exponencial explícito de Lawson o los exponenciales de splitting para nuestro problema.

2.5.1 Ondas Solitarias.

Nos centramos a continuación en la comparación numérica cuando se integran ondas solitarias. Dado que estas ondas no cambian su forma con el tiempo parece apropiada una implementación con paso fijo. En todos los experimentos de esta subsección se han tomado $[a, b] = [-50, 250]$ y $M = 1000$ para la discretización espacial como ya se explicó previamente.

Por otra parte, el error en el Hamiltoniano se calcula aproximando H en forma pseudoespectral como ya se describió en [12] y en la expresión (13) de la Sección 1.2.

Para la comparación primero hemos considerado el siguiente método de Strang (splitting) de orden 2 [45]

$$u_{n+1} = e^{\frac{\hbar}{2}i\Delta} \phi_h(e^{\frac{\hbar}{2}i\Delta} u_n), \quad (2.11)$$

donde $\phi_h(y) = e^{hif(|y|^2)}y$ corresponde a la solución exacta de la segunda ecuación de (2.10). (La convergencia en norma de orden 2 para este método para soluciones suficientemente regulares está ampliamente probada en [38]). Los errores en H y la norma L^2 cuando se integra la onda solitaria (2.9) de la ecuación cúbica de Schrödinger se muestran en la Figura 2.7. Se observa que el error en la norma L^2 para la solución crece linealmente con el tiempo mientras que el error en el Hamiltoniano permanece acotado del mismo modo que ocurre con los métodos proyectados de Lawson cuando se integra esta ecuación. Si observamos la Figura 2.8 observamos el mismo tipo de error para el método de proyectado de Lawson basado en (2.7). A causa de esto, solo hemos hecho la comparación numérica en términos de eficiencia hasta

$t = 1$ dado que el comportamiento a largo plazo es el mismo para ambos tipos de métodos.

En la Figura 2.9 se muestra el error en la norma L^2 y en el Hamiltoniano frente al tiempo de cpu para el método de Strang (2.11) y el proyectado de Lawson basado en (2.7). Como puede observarse, el método de splitting de Strang es mucho más competitivo que el proyectado de Lawson en ambos invariantes. Notemos que el método de splitting de Strang solo necesita una FFT y una IFFT en cada paso mientras que el método explícito de Lawson proyectado requiere dos de cada por cada paso.

Sin embargo, atendiendo a la literatura existente para métodos clásicos óptimos de tipo Runge-Kutta y explícitos sin ningún tipo de requerimiento de simetría o simplecticidad [29] y la literatura existente en métodos de splitting simétricos o composición de métodos [9, 27], se puede observar que si lo que se desea es mayor orden, el primero requiere menos etapas que el segundo.

Para la comparación con métodos de orden 4, hemos considerado:

- Método proyectado de Lawson basado en el método de Runge-Kutta clásico de orden 4 (2.8) (**PLC4**), el cual ya ha sido sugerido como bueno incluso antes de proyectar para la ecuación de Schrödinger no lineal en [6]. Este método consta de 4 etapas y, por lo tanto, requiere 4 evaluaciones de función por paso.
- Método proyectado de Lawson basado en el método de Fehlberg de orden 4 [29] (**PLF4**), para el cual los coeficientes del término principal del error de truncación local están minimizados, aunque el método posee 6 etapas.
- Método de splitting simétrico de Yoshida de orden 4 [49] (**SY4**), también sugerido en [6] como una buena opción para la integración de (2.1). Más precisamente, el método es

$$u_{n+1} = \Psi_{c_1 h} \circ \Psi_{c_0 h} \circ \Psi_{c_1 h}, \quad \text{with } c_0 = -\frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}, \quad c_1 = \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}},$$

donde Ψ_h es el método de splitting de Strang (2.11). Con este método, en cada paso, se deben llevar a cabo 3 evaluaciones de función.

- Método de splitting de Blanes & Moan de orden 4 [9] (**SBM4**). Este método se denota como $SRKN_6^b$ en dicho artículo y es también sugerido como el óptimo para la ecuación de Schrödinger. Aunque consta de 6 etapas, el error de truncación local está fuertemente minimizado.

En la Figura 2.10 se muestran el error para la norma L^2 y el Hamiltoniano cuando integramos la misma solución y con la misma longitud de paso que en la Figura 2.9. Es claro que el método de splitting de Blanes & Moan es el mejor aunque el rendimiento relativo de los métodos proyectados de Lawson frente a los de splitting con respecto a métodos de orden 2 han mejorado.

Conclusiones similares se pueden establecer para los métodos de orden 6. Ahora hemos considerado:

- Método proyectado de Lawson basado en el método de Verner de orden 6 [29] (**PLV6**), el cual consta de 8 etapas.
- Método de splitting simétrico de Yoshida de orden 6 [27] (**SY6**), el cual resulta ser el óptimo en la búsqueda del mínimo número de etapas. Posee 7 etapas.
- Método de splitting de Blanes & Moan de orden 6 [9] (**SBM6**). Este método se denota por $SRKN_{14}^a$ en ese artículo y es también sugerido como óptimo para la ecuación Schrödinger. Aunque tiene 14 etapas, el error de truncación local está muy minimizado.

La Figura 2.11 también muestra que el método de splitting de Blanes & Moan es, todavía, el mejor.

Asimismo podemos observar lo que ocurre cuando atendemos a métodos de orden 8. Si nos centramos en los métodos óptimos que aparecen en la literatura podemos comparar:

- Método proyectado de Lawson basado en el método de Dormand & Prince [41] de orden 8 (**PLDP8**), el cual posee 13 etapas.
- Método de composición simétrico de Kahan & Li de orden 8 [27] (**SKL8**) basado en el método de splitting de Strang. Consta de 17 etapas.

En la Figura 2.12 se muestra que el método proyectado de Lawson funciona mejor que el de splitting, al menos para la ecuación cúbica de Schrödinger y la solución de un solitón.

Cuando nos fijamos en métodos de orden 10 se observa que se incrementa la diferencia entre el número de etapas de los métodos óptimos entre los de tipo de Runge-Kutta clásico y los métodos simétricos de splitting. En particular, hemos considerado:

- Método proyectado de Lawson basado en el método de Hairer de orden 10 [26] (**PLH10**), el cual consta de 17 etapas.
- Método de composición simétrico de Sofronio & Spaletta orden 10 [27] (**SSS10**) basado en el método de splitting de Strang, consistente en 35 etapas.

En la Figura 2.13 se muestra cómo el método proyectado de Lawson todavía funciona mejor que el método de splitting pero el funcionamiento relativo con respecto a los métodos de orden 8 no mejora tanto como podría esperarse dada la mayor diferencia en el número de etapas. Esto se debe al hecho de que el término principal del error de truncación local correspondiente al método de splitting de Sofronio & Spaletta es menor que el correspondiente al método de Hairer. Se observa en la Figura 2.13 que, para un paso fijo, el error es más pequeño para el método de splitting que para el método proyectado de Lawson. Solo la gran diferencia en coste computacional para el mismo tamaño de paso es el que hace que el método de Lawson sea más eficiente que el método de splitting.

2.5.2 Otras soluciones que requieren una implementación adaptativa.

En esta subsección consideraremos el problema (2.1) con $d = 2$, $\mu = \frac{1}{2}$,

$$u_0(\mathbf{x}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-0.5|\mathbf{x}|^2}, \quad (2.12)$$

y las siguientes dos posibilidades para $f(s)$

$$(i) f(s) = 2s, \quad (ii) f(s) = -2s.$$

j	a_j	j	b_j
1	0	1, 7	0.0829844064174052
2, 7	0.245298957184271	2, 6	0.3963098014983680
3, 6	0.604872665711080	3, 5	-0.0390563049223486
4, 5	$1/2 - (a_2 + a_3)$	4	$1 - 2(b_1 + b_2 + b_3)$
j	\hat{a}_j	j	\hat{b}_j
1	a_1	1	b_1
2	a_2	2	b_2
3	a_3	3	b_3
4	a_4	4	b_4
5	0.3752162693236828	5	0.4463374354420499
6	1.4878666594737946	6	-0.0060995324486253
7	-1.3630829287974774	7	0

Tabla 2.1: Coeficientes del par encajado de órdenes 4(3) basado en el esquema de orden 4 de B & M

El primer caso corresponde a una singularidad de tipo ‘focusing’ que conduce a un comportamiento de explosión o ‘blow up’ y fue utilizado en [36] para ejemplificar el uso de splittings encajados con paso variable, los cuales reducen los tamaños del paso cuando se aproximan al tiempo de ‘blow up’. La condición inicial y la solución a tiempo $t = 1$ se muestran en la Figura 2.14 (a,b). Por el contrario, el caso (ii) corresponde a una solución de tipo ‘defocusing’. Según el tiempo avanza la solución se expande y decrece lentamente. En la Figura 2.14 (c) se muestra la solución para $t = 40$. En este caso una implementación adaptativa conduce a considerar tamaños de paso más grandes cuando el tiempo aumenta. Es importante observar aquí que la condición inicial (2.12) satisface las hipótesis del Teorema 2.3.5 y, por lo tanto, cuando se integra con métodos proyectados de Lawson, el error en I_2 desaparece. Aunque no se muestra aquí, este hecho ha sido corroborado numéricamente.

A continuación el objetivo es comentar la implementación de los métodos proyectados de Lawson cuando se basan en los adaptativos y encajados de Runge-Kutta y compararlos con los métodos exponenciales de splitting encajados. Para ello se ha tomado el método de orden 4(3) de splitting y encajado

sugerido en [36], el cual se basa en el esquema de Blanes & Moan [9], y cuyo comportamiento numérico fue mostrado para el problema (i) también en [36]. Los coeficientes de ese método se muestran en la Tabla 3.3.1 y el método se describe a continuación

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= \phi_{b_7 h_n} \circ e^{ia_7 \mu h_n \Delta} \circ \dots \circ \phi_{b_2 h_n} \circ e^{ia_2 \mu h_n \Delta} \circ \phi_{b_1 h_n} \circ e^{ia_1 \mu h_n \Delta}(u_n), \\ \hat{u}_{n+1} &= \phi_{\hat{b}_7 h_n} \circ e^{i\hat{a}_7 \mu h_n \Delta} \circ \dots \circ \phi_{\hat{b}_2 h_n} \circ e^{i\hat{a}_2 \mu h_n \Delta} \circ \phi_{\hat{b}_1 h_n} \circ e^{i\hat{a}_1 \mu h_n \Delta}(u_n), \end{aligned}$$

donde $\phi_h(y) = e^{hif(|y|^2)}y$ de nuevo corresponde a la solución exacta de la segunda ecuación de (2.10).

Para una tolerancia TOL dada se ha tomado como tamaño inicial de paso

$$h = \text{TOL}^{\frac{1}{5}},$$

teniendo en cuenta que el método tiene orden 4 y el error tras un paso corresponde al error local. Después, a cada paso, el tamaño de paso se ajusta considerando una estimación del error cometido a través de

$$\text{EST} = \|u_{n+1} - \hat{u}_{n+1}\|_{L^2},$$

y escogiendo

$$h_{\text{nuevo}} = h_{\text{viejo}} \cdot \min\left(1.5, \max\left(0.2, \left(\frac{\text{TOL}}{\text{EST}}\right)^{\frac{1}{4}}\right)\right).$$

Esta iteración continua hasta que $\text{EST} < \text{TOL}$, en cuyo caso h_n se toma como el último tamaño de paso h_{nuevo} . Para el siguiente paso el iterante inicial para h_{n+1} se toma como h_n .

Es importante observar que este procedimiento no permite concatenar pasos como con una implementación de tamaño de paso fijo. Por otra parte las exponenciales que permiten calcular fácilmente $e^{ia_j h_n \mu \Delta} u$ no pueden ser calculadas ahora al principio sino que necesitan ser calculadas en cada iteración dado que el valor de h_n cambia.

Por otro lado, dado que $\hat{a}_j = a_j (j = 1, 2, 3, 4)$, cuando se calcula \hat{u}_{n+1} , algo más de la mitad del coste ya ha sido realizado en el cálculo de u_{n+1} . Para ser más preciso, dado que $a_1 = \hat{b}_7 = 0 = \hat{a}_1$, y la simetría

$$a_2 = a_7, \quad a_3 = a_6, \quad a_4 = a_5,$$

cada iteración del método de splitting encajado conlleva el cálculo de 15 exponenciales vectoriales punto a punto, 8 FFTs y 8 IFFTs. Es interesante insistir en que, para un número de nodos suficientemente grande en la discretización pseudoespectral, la mayor parte del coste computacional proviene de esto y no de otros productos de escalares con vectores o productos de vectores punto a punto que también sean necesarios.

Consideremos a continuación los métodos proyectados de Lawson encajados de Runge-Kutta. Para ello hemos de tener en cuenta que el método que es utilizado para obtener una estimación del error viene dado por

$$\hat{u}_{n+1} = e^{ih_n\mu\Delta}u_n + hi \sum_{r=1}^s \hat{b}_r e^{i(1-c_r)h_n\mu\Delta} f(|K_r|^2)K_r,$$

$$\hat{\hat{u}}_{n+1} = \sqrt{\frac{I_1(u_n)}{I_1(\hat{u}_{n+1})}} \hat{u}_{n+1}.$$

(En nuestros experimentos hemos encontrado que es más eficiente proyectar también \hat{u}_{n+1} con el fin de obtener la mejor estimación del error). De aquí que, en cada iteración, una vez que se calcula u_{n+1} mediante (2.3)-(2.4), ya no sean necesarias más exponenciales vectoriales punto a punto ni más FFTs o IFFTs para calcular \hat{u}_{n+1} . El único coste adicional es una nueva combinación lineal de vectores previamente calculados. No obstante, del mismo modo que ocurre con los métodos de splitting encajados, se necesitan rehacer exponenciales vectoriales para calcular u_{n+1} en cada iteración dado que éstas sí dependen del tamaño particular de cada paso que es cambiante.

Para la comparación con los métodos de splitting encajados arriba mencionados hemos escogido como pares clásicos encajados de Runge-Kutta: Fehlberg 4(5) y Dormand & Prince 5(4) [29]. Es comunmente conocido que el último posee un rendimiento mejor en implementaciones adaptativas que el primero a pesar de que el primero consta de 6 etapas y el último de 7.

En ambos métodos, dado que el orden de los esquemas encajados es 4, el nuevo paso después de cada iteración se calcula mediante

$$h_{\text{nuevo}} = h_{\text{viejo}} \cdot \min\left(1.5, \max\left(0.2, \left(\frac{TOL}{EST}\right)^{\frac{1}{5}}\right)\right).$$

Es importante mencionar que en los métodos explícitos la primera etapa no cambia en cada iteración sino en cada paso. Por ello, la evaluación de

$f(|K_1|^2)K_1$ en el espacio de los coeficientes aproximados de Fourier, se lleva a cabo solo en cada paso y no en cada iteración. Por otra parte es de reseñar que se producen algunas coincidencias en los valores

$$\{c_r\}_{r=1}^s, \quad \{c_r - c_j\}_{\substack{r \in \{1, \dots, s\} \\ j \in \{1, \dots, r-1\}}}, \quad \{1 - c_r\}_{r=1}^s,$$

los cuales determinan las exponenciales vectoriales punto a punto que son necesarias calcular. Además, si alguno de esos valores se anula, las exponenciales no son necesarias. Lo mismo ocurre cuando los coeficientes asociados a una exponencial son cero.

De lo anterior, con la fórmula encajada para el método proyectado de Lawson Fehlberg, en cada paso se llevan a cabo 1 FFT y 1 IFFT con independencia del número de iteraciones. Además, se realizan en cada iteración, 12 exponenciales vectoriales punto a punto, 5 FFTs y 5 IFFTs.

Finalmente, para las fórmulas encajadas de Dormand & Prince, se debe resaltar que se aplica la propiedad FSAL [29], lo cual implica que u_{n+1} y K_7 son calculadas al mismo tiempo. Su ventaja es aún más destacable con una implementación de paso variable que con una implementación uniforme. Cabe destacar que el hecho de que $b_7 = 0$ significa que no hay necesidad de evaluar $f(|K_7|^2)K_7$ con una implementación de tamaño de paso fijo para calcular u_{n+1} a partir de u_n (\hat{u}_{n+1} no se requiere). Sin embargo, en el paso siguiente, u_n coincide con el valor previo de K_7 y $f(|u_n|^2)u_n$ necesita ser calculado de cualquier modo. Con la implementación adaptativa ($\hat{b}_7 \neq 0$), los $f(|K_7|^2)K_7$ deben ser calculados pero no serán requeridos en el siguiente paso. En resumen, con el par encajado de Lawson Dormand & Prince, fundamentalmente cada iteración conlleva 6 FFTs, 6 IFFTs y 14 exponenciales vectoriales punto a punto.

Para la comparación numérica de los métodos arriba citados, el dominio espacial y el número de nodos N para la discretización espacial que han sido utilizados en cada problema son

- (i) $[-16, 16] \times [-16, 16]$ y $N = 512^2$,
- (ii) $[-200, 200] \times [-200, 200]$ y $N = 1024^2$,

de modo que el error en espacio es despreciable. Las Figuras 2.15 y 2.16 muestran el error en el Hamiltoniano frente al tiempo en cada paso para

ambos problemas con el método de splitting encajado y el método de Lawson encajado D&P. (Los resultados para el método de Fehlberg son similares y no se presentan aquí por razones de brevedad). Como puede observarse, para cada problema, el comportamiento del error es el mismo para todos los métodos considerados. Para el problema (i), el error crece exponencialmente a tiempo $t = 1$ mientras que para el problema (ii) el error permanece acotado, al menos, a tiempo $t = 40$.

A continuación, en las Figuras 2.17 y 2.18, se muestra el error en el Hamiltoniano frente al tiempo de cpu para un valor fijo del tiempo para los tres métodos considerados arriba y los problemas (i) y (ii) respectivamente. Para la singularidad de tipo ‘focusing’, hasta $t = 1$, los métodos de splitting y los pares de Lawson Dormand & Prince sí se comportan muy similarmente mientras que el método de Fehlberg Lawson es más barato solo para errores entre 10^{-5} y 10^{-7} . Para el problema de tipo ‘defocusing’, hasta $t = 40$, el método proyectado de Lawson encajado D&P funciona mejor que el método de splitting encajado para errores menores que 10^{-4} y los esquemas proyectados de Fehlberg Lawson funcionan mejor que los esquemas de splitting para errores superiores a 10^{-4} .

Sí nos gustaría remarcar en esta sección que hemos escogido estos métodos alrededor de orden 4 para llevar a cabo la comparación con implementaciones adaptativas ya que los métodos de splitting encajados de orden más altos que se han construido en la literatura poseen ese orden. Para órdenes incluso superiores, la comparación es probablemente más favorable hacia métodos proyectados de Lawson.

2.6 Conclusión.

Cuando se intenta integrar con bastante precisión soluciones regulares de la ecuación de Schrödinger no lineal que son simétricas con respecto a un punto en un momento dado, deben ser tenidos en cuenta los métodos de Lawson proyectados ortogonalmente sobre I_1 . Por otra parte, del hecho de que no solo I_1 sino también I_2 se conserve, se deduce que el método sea apropiado para integraciones a largo plazo, al menos, para la integración de soluciones de onda solitaria [19]. Por otra parte resulta que el método también es computacionalmente competitivo frente a otros métodos de la

literatura. Los siguientes aspectos están a favor de los métodos proyectados de Lawson frente a los de splitting:

- (a) **Elevado orden de precisión con el tiempo.** Incrementar el orden significa que el número de etapas de ambos tipos de métodos se incrementa, pero se incrementa más lentamente con los métodos explícitos de tipo Runge-Kutta que con los de splitting.
- (b) **Elevado número de nodos para la discretización espacial.** Esto es debido al hecho de que el número de nodos está relacionado directamente con las FFTs y IFFTs que deben necesariamente realizarse. Su coste es $O(N \log N)$ frente a $O(N)$ de las exponenciales vectoriales punto a punto, productos de escalares con vectores y productos de vectores con vectores punto a punto.
- (c) **Implementación adaptativa.** Considerar un segundo método encajado para estimar el error significa más FFTs y exponenciales vectoriales punto a punto para los métodos de splitting, pero no más para los métodos proyectados de Lawson.

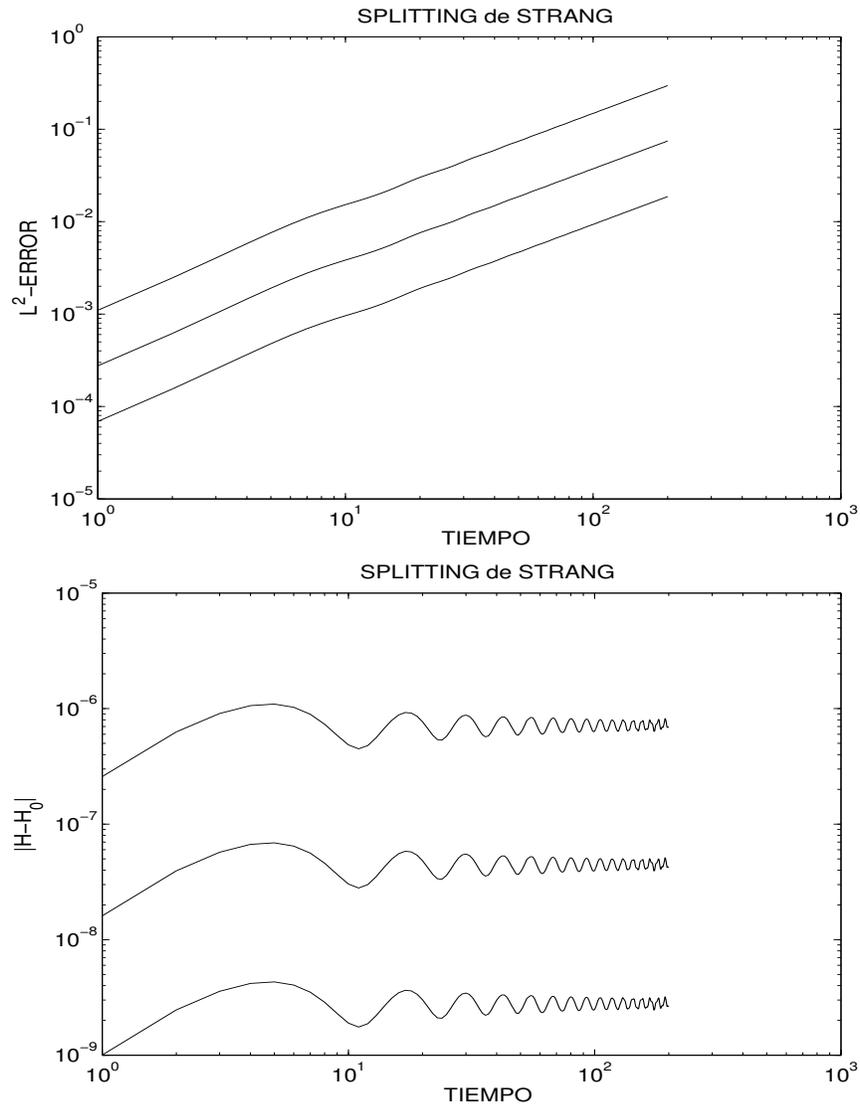


Figura 2.7: Error en norma L^2 y H con splitting de Strang y condición inicial correspondiente a una onda solitaria, $h = 0.1$ (arriba), 0.05 (medio), 0.025 (abajo).

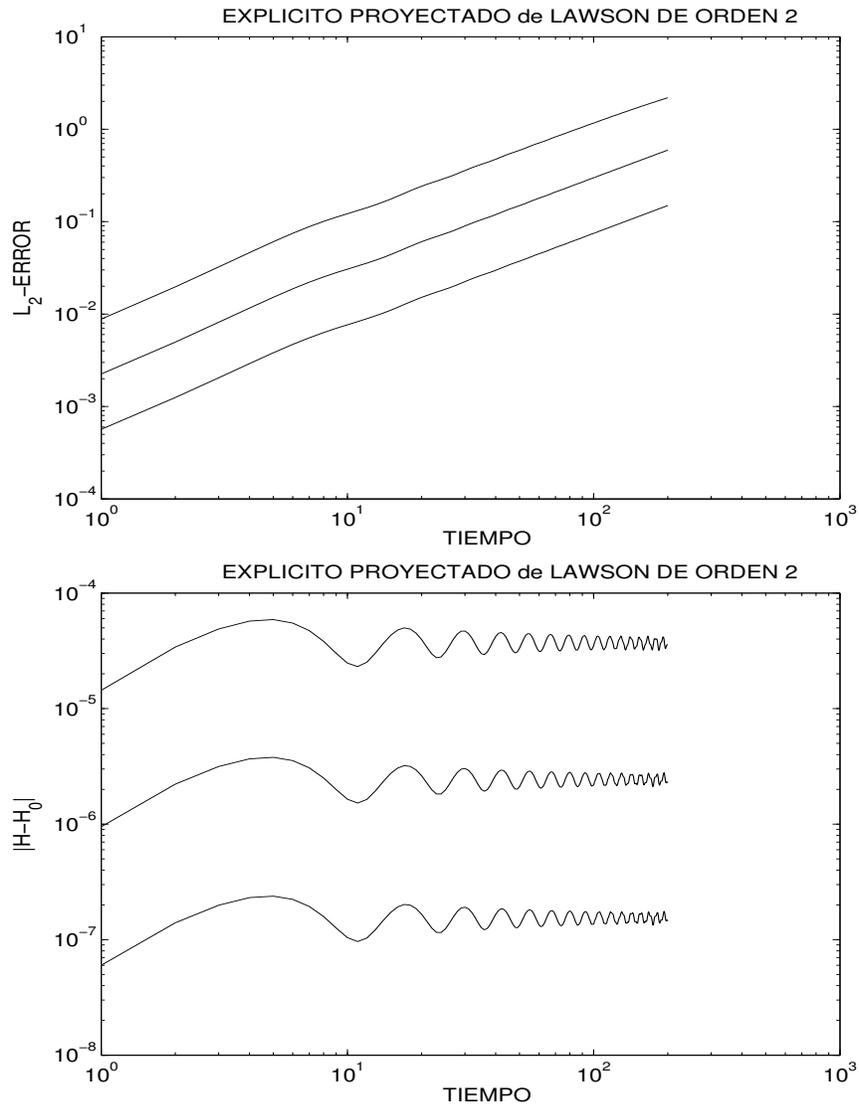


Figura 2.8: Error en norma L^2 y H con el método proyectado de Lawson basado en (2.7) y condición inicial correspondiente a una onda solitaria, $h = 0.1$ (arriba), 0.05 (medio), 0.025 (abajo).

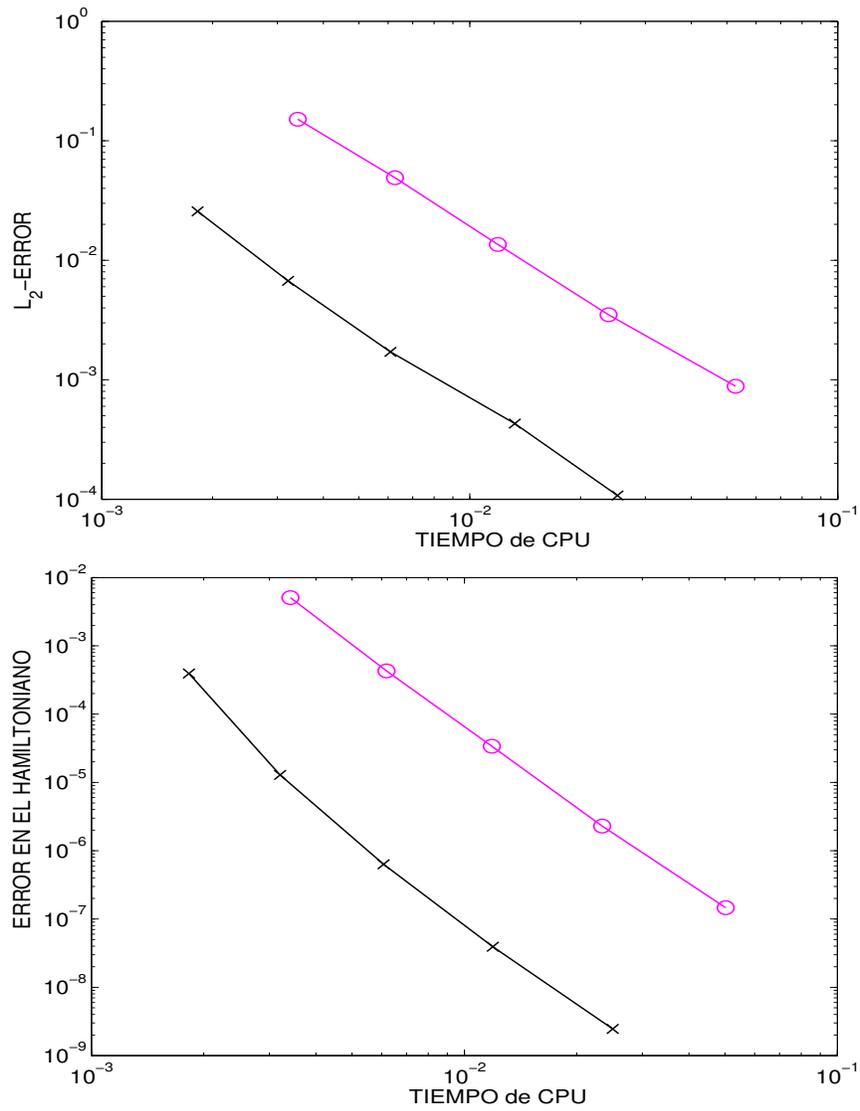


Figura 2.9: Error en norma L^2 y H frente a tiempo de CPU con splitting de Strang (x negro) y Lawson proyectado (2.7) (o magenta), $h = 0.5, 0.25, \dots$

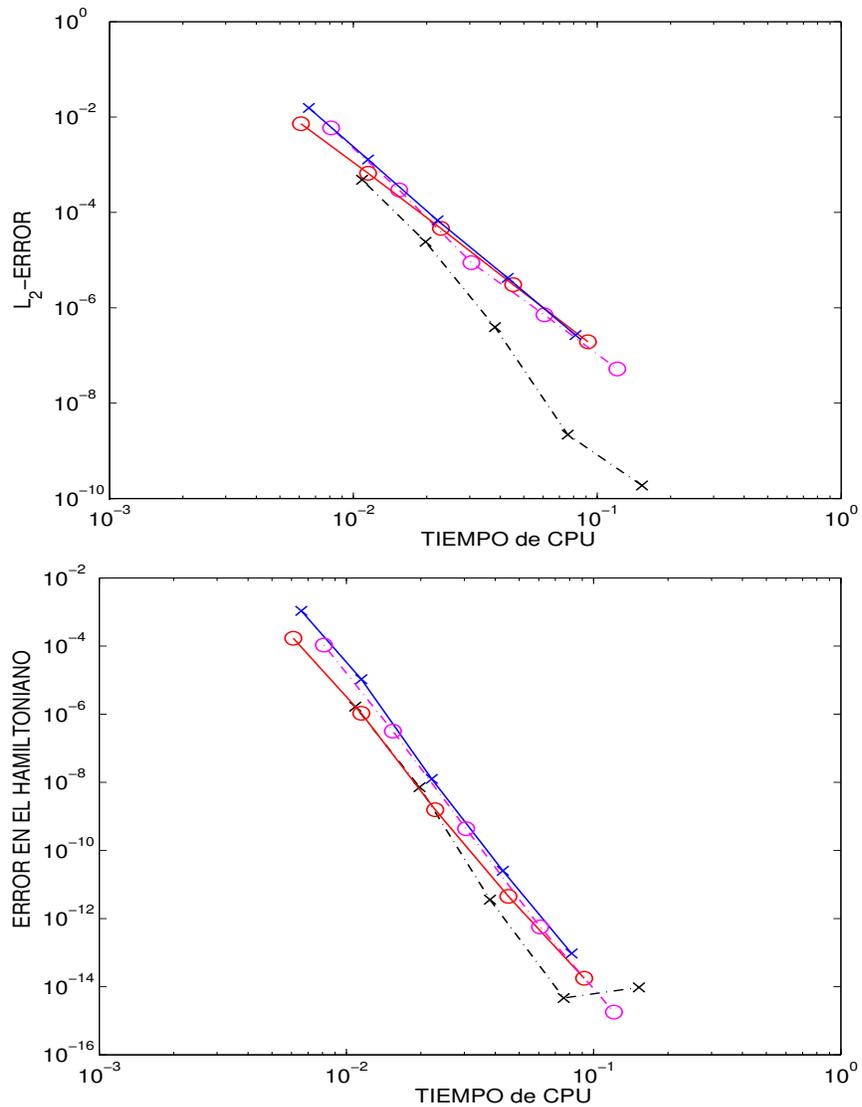


Figura 2.10: Error en norma L^2 y H frente a tiempo de CPU con Lawson proyectado PLC4 (o rojo, línea continua) y PLF4 (o magenta, línea discontinua) y splittings SY4 (x azul, línea continua) y SBM4 (x negro, línea discontinua), $h = 0.5, 0.25, \dots$

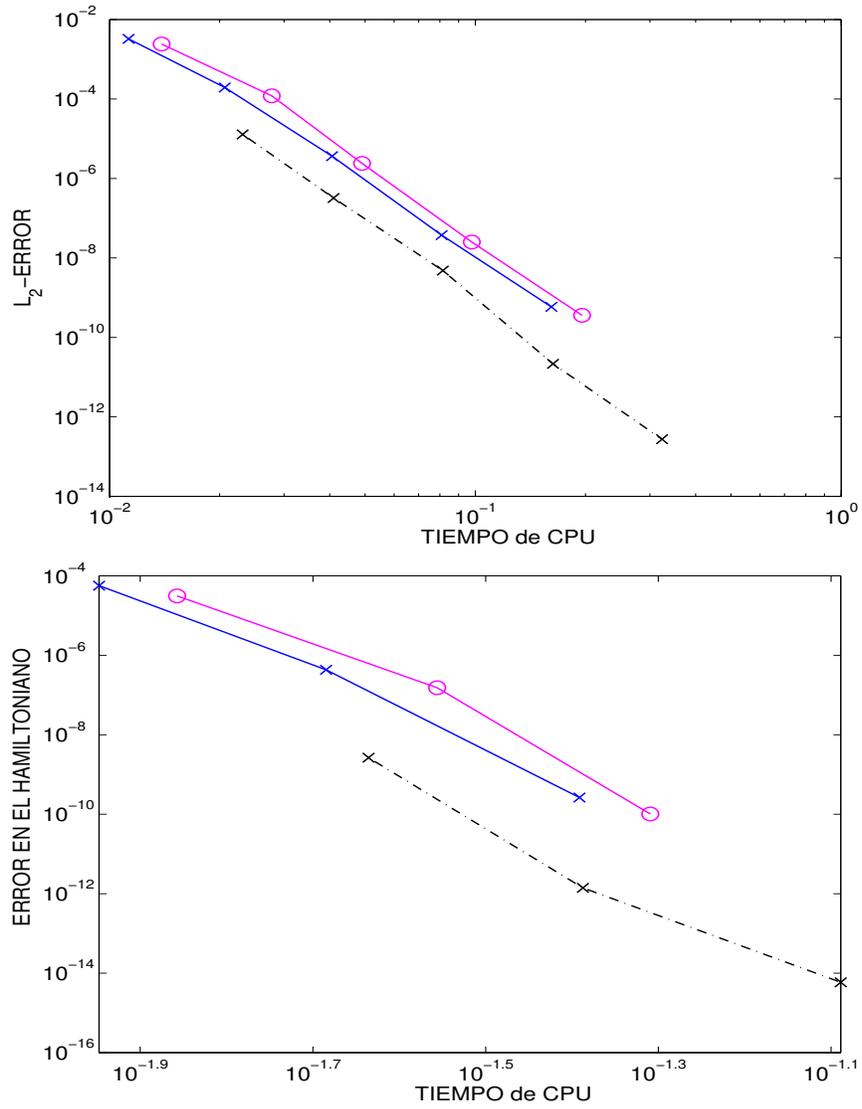


Figura 2.11: Error en norma L^2 y H frente a tiempo de CPU con Lawson proyectado PLV6 (o magenta) y splittings SY6 (x azul, línea continua) y SBM6 (x negro, línea discontinua), $h = 0.5, 0.25, \dots$

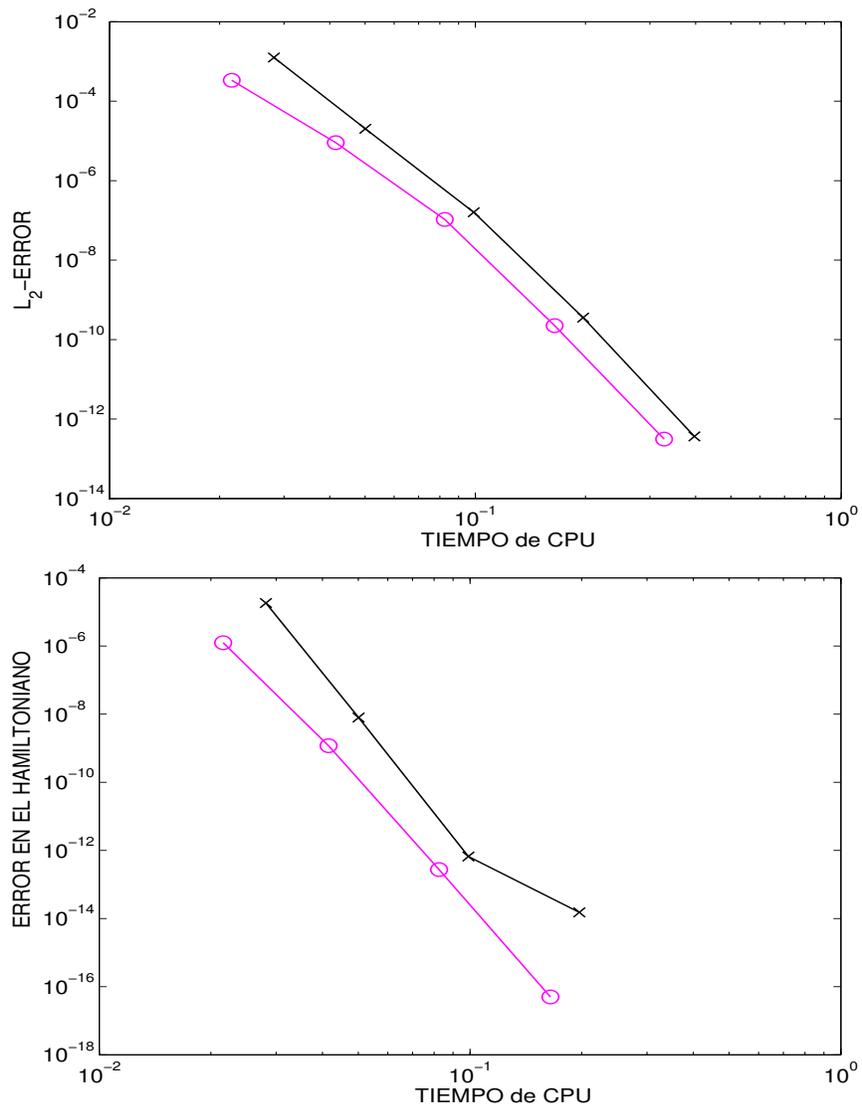


Figura 2.12: Error en norma L^2 and H frente a tiempo de CPU con Lawson proyectado PLDP8 (o magenta) y splitting SKL8 (x negro), $h = 0.5, 0.25, \dots$

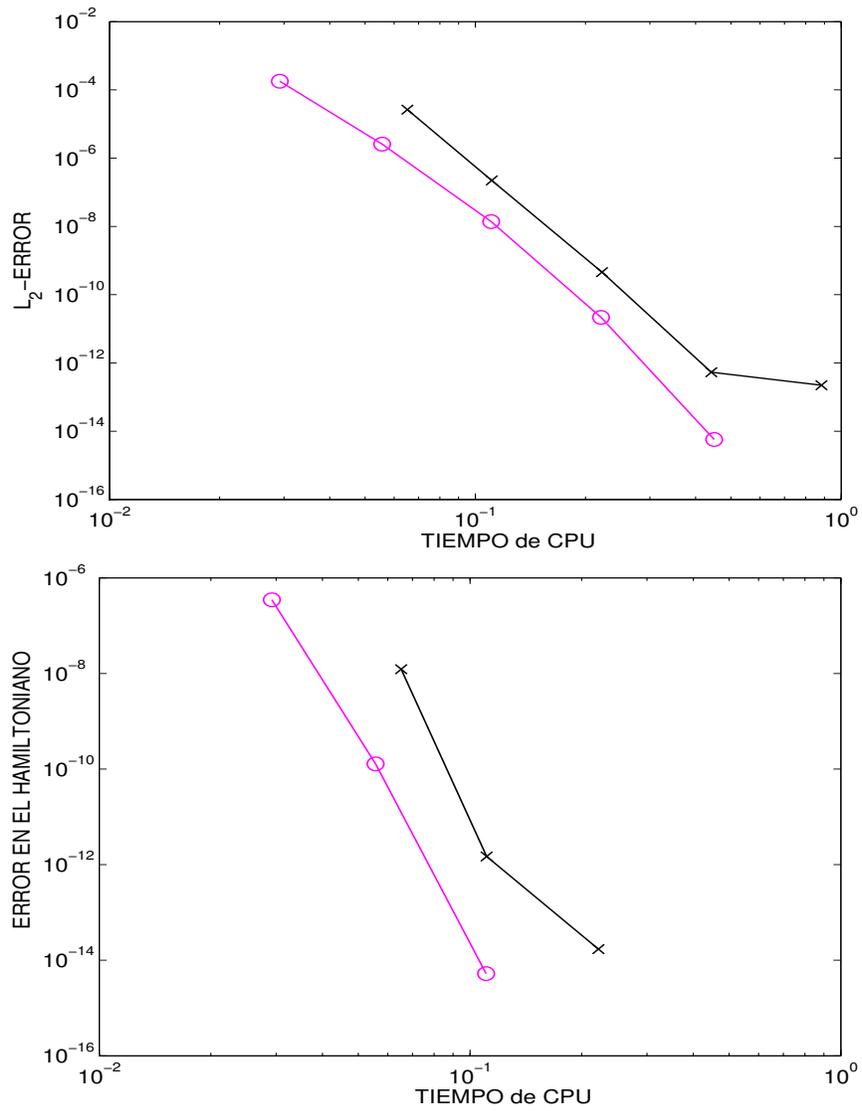


Figura 2.13: Error en norma L^2 y H frente a tiempo de CPU con Lawson proyectado PLH10 (o magenta) y splitting SSS10 (x negro), $h = 0.5, 0.25, \dots$

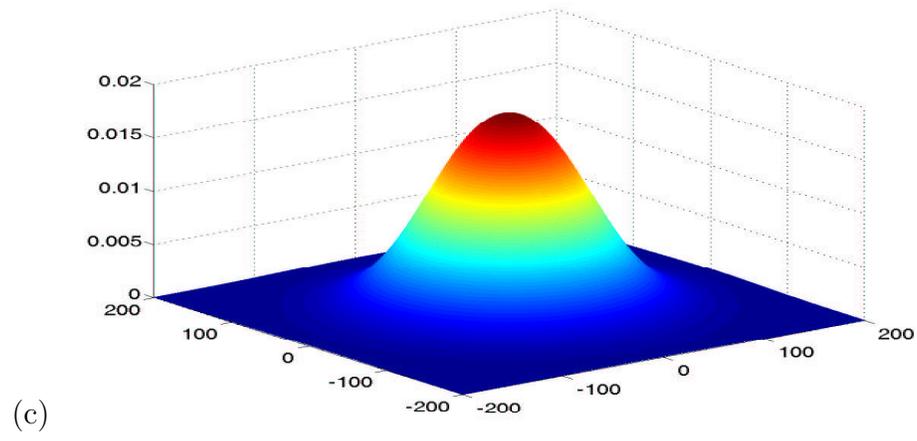
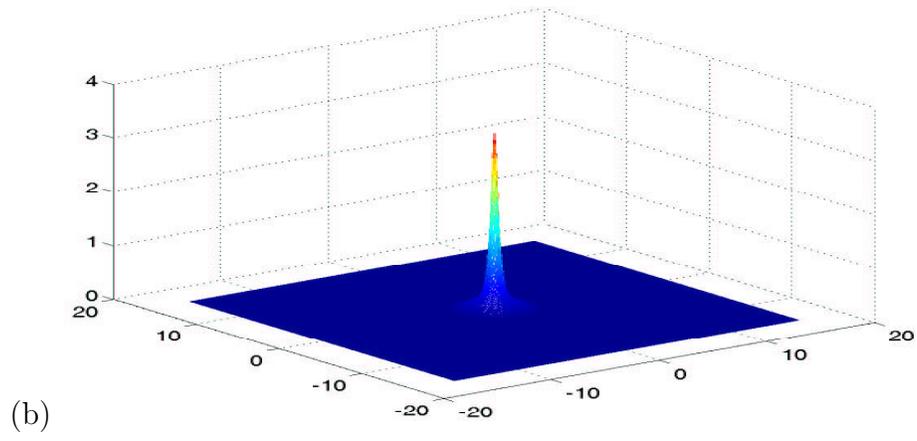
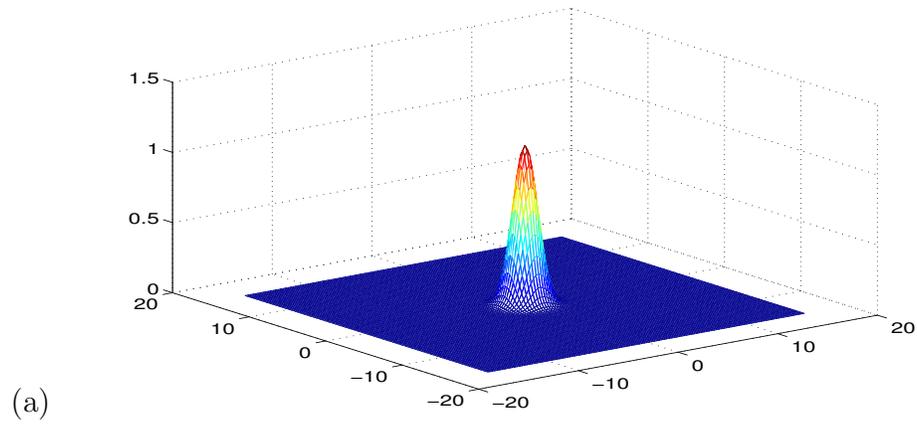


Figura 2.14: (a) Condición inicial, (b) Solución en $t = 1$ para el problema ‘focusing’ (i), (c) Solución en $t = 40$ para el problema ‘defocusing’ (ii)

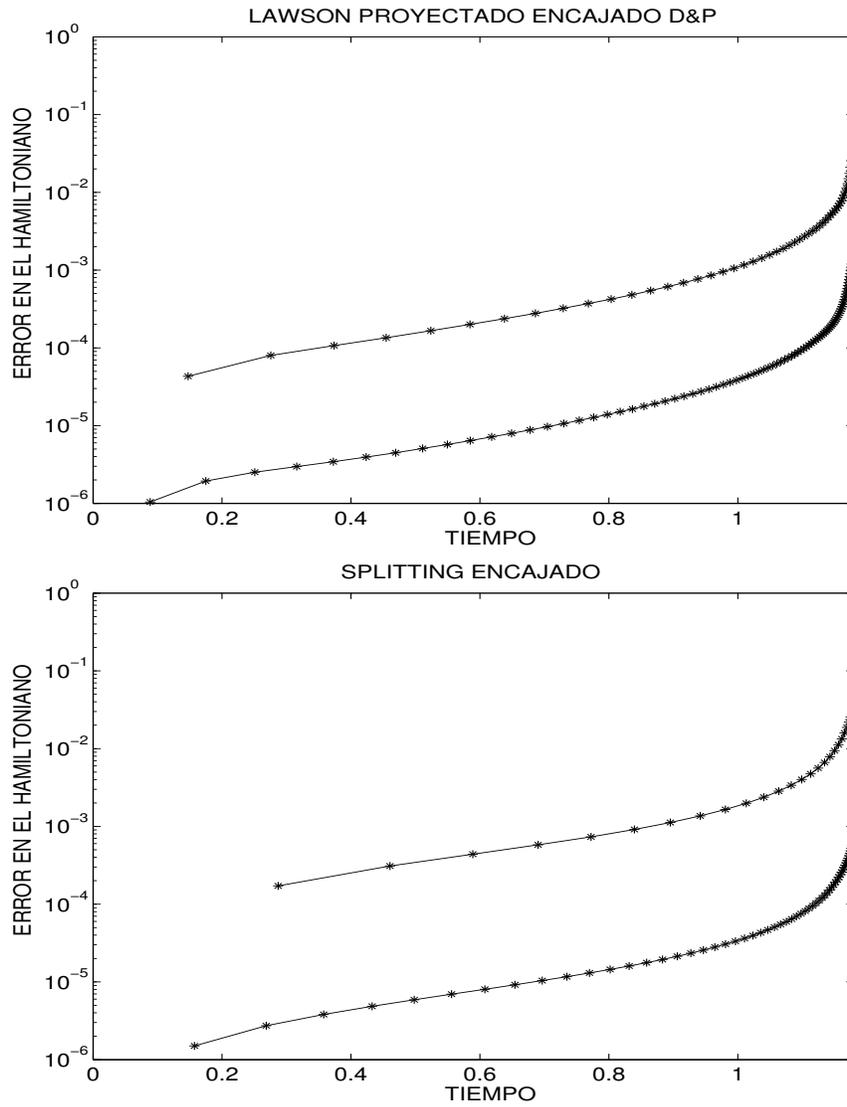


Figura 2.15: Error en H frente al tiempo para el problema (i) con el método proyectado de Lawson encajado D & P ($TOL= 10^{-4}, 10^{-5}$) y método de splitting encajado, ($TOL= 10^{-2}, 10^{-3}$)

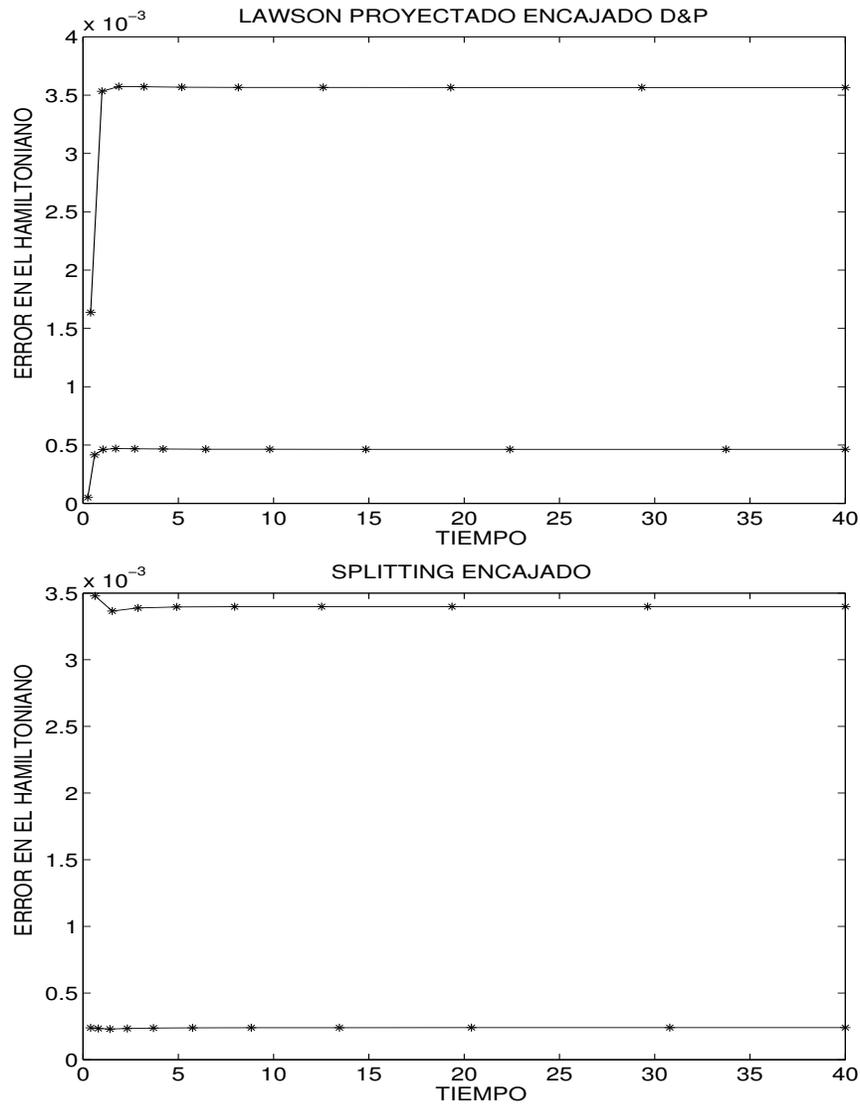


Figura 2.16: Error en H frente al tiempo para el problema (ii) con el método proyectado de Lawson encajado D & P ($TOL= 10^{-2}, 10^{-3}$) y método de splitting encajado ($TOL= 10^{-1}, 10^{-2}$)

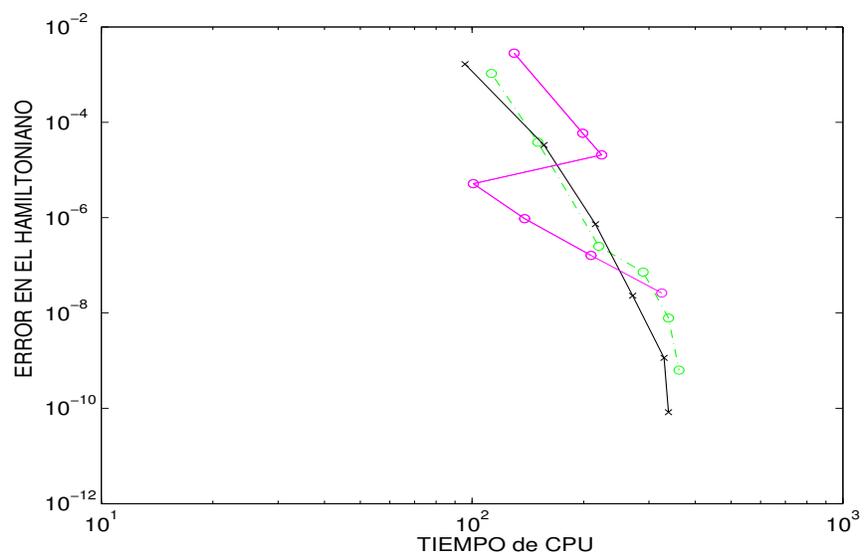


Figura 2.17: Error en H frente al tiempo de CPU para el problema (i) con el método proyectado de Lawson Fehlbberg encajado (o magenta, línea continua) y D & P (o green, línea discontinua), $TOL = 10^{-4}, 10^{-5}, \dots$ y método de splitting KNT (x negro), $TOL = 10^{-2}, 10^{-3}, \dots$

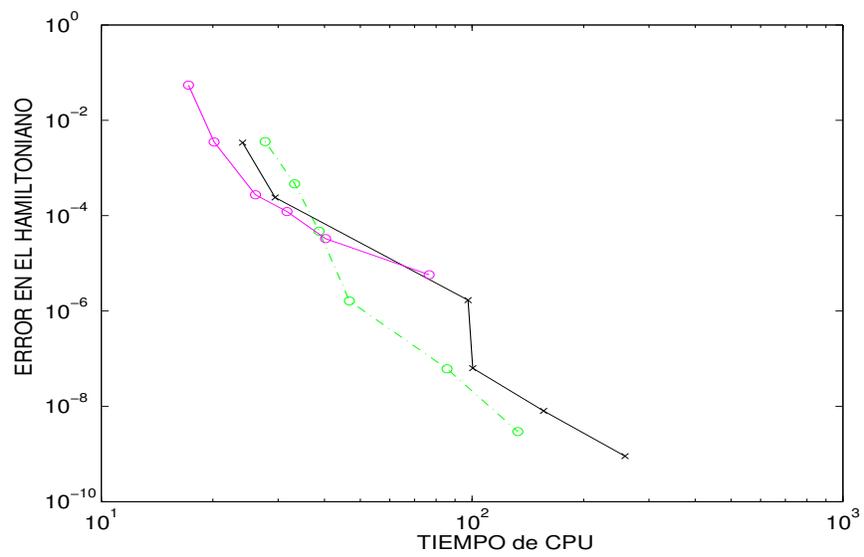


Figura 2.18: Error en H frente al tiempo de CPU para el problema (ii) con el método proyectado de Lawson Fehlberg encajado (o magenta, línea continua) y D&P (o verde, línea discontinua), $TOL= 10^{-2}, 10^{-3}, \dots$ y método de splitting KNT (x negro), $TOL= 10^{-1}, 10^{-2}, \dots$

Capítulo 3

Estabilidad integrando ondas planas.

3.1 Introducción.

La estabilidad numérica de las soluciones de tipo onda plana de la ecuación cúbica de Schrödinger ya ha sido objeto de estudio en la literatura. En primer lugar podemos decir que ese análisis ya se ha hecho en [48] para el método de splitting de Lie de primer orden cuando la condición inicial simplemente se somete a una pequeña perturbación de una constante. En segundo lugar, en [18] el estudio se lleva a cabo para dos métodos implícitos (Besse y Fei) y para un caso más general de pequeñas perturbaciones de las condiciones iniciales de la forma $u_0(x) = ae^{ikx}$ ($a \in \mathbb{C}, k \in \mathbb{R}$). En todos los casos anteriores el análisis se basó en la estabilidad lineal en el sentido de que se ignoraban los términos cuadráticos de la perturbación. A continuación se ha desarrollado en [20] un análisis utilizando desarrollos de Fourier modulados para el método de splitting de Strang. Ese tipo de análisis es teóricamente válido para grandes valores del tiempo aunque requiere más restricciones sobre los parámetros de integración. No obstante, hasta donde conocemos, no existe una comprobación numérica de los beneficios de ser más restrictivo.

Por otra parte, muy recientemente, los métodos exponenciales de splitting y los métodos de Lawson basados en esquemas tipo Runge-Kutta [6, 36] han sido profundamente desarrollados y recomendados para la ecuación cúbica de Schrödinger por otros autores y de hecho un análisis comparativo de los mismos ha sido realizado en el capítulo anterior de esta tesis. Los primeros conservan dos invariantes (norma and momento) mientras que los últimos no. Sin embargo, en el capítulo 2 de esta tesis, las conclusiones son que, tras proyectar sobre el invariante de la norma (procedimiento muy barato), también se proyecta sobre el invariante del momento para muchas soluciones y, las soluciones de onda plana, están entre ellas. En la comparación con los métodos de splitting, en términos de eficiencia computacional, el alto grado de precisión en espacio y en tiempo se encuentra a favor de los métodos proyectados de Lawson aunque los métodos exponenciales de splitting son también muchas veces una herramienta preferible.

El objetivo de este capítulo es analizar y comparar ambos tipos de métodos con respecto a su comportamiento en términos de estabilidad numérica cuando se integran soluciones de onda plana. Para ello nos centraremos, en una primera etapa y por simplicidad, en los métodos de segundo orden: el método de splitting de Strang [47] y los métodos explícitos de Lawson de 2 etapas con soporte Runge-Kutta. Este último es una familia uniparamétrica de métodos y todos los análisis serán llevados a cabo en términos de dicho parámetro (d). Además se considerarán tanto los métodos proyectados sobre el invariante de la norma como los que no lo son. Para los experimentos numéricos hemos escogido la discretización pseudoespectral dada su elevada precisión para soluciones regulares y también porque se adecúa perfectamente con el análisis de las diferentes frecuencias lo cual se ha hecho en a lo largo de este capítulo para el problema continuo en espacio.

Veremos que los métodos de splitting de Strang, excepto por los errores de redondeo, integran exactamente en el tiempo las soluciones de onda plana. Los métodos de Lawson, sin embargo, carecen de esta propiedad. A pesar de ello, cuando se proyectan sobre el invariante de la norma se obtiene que, no solo desaparece el error en el momento, sino también desaparece en el Hamiltoniano para este tipo de soluciones. Estos hechos nos conducen a conjeturar que los métodos proyectados se comportarán mejor en términos de estabilidad.

Una conclusión de este capítulo es que los resultados obtenidos van a

ser independientes de la frecuencia k de la onda no perturbada en contraste con lo que ocurre con los métodos de Besse & Fei en [18]. Por otra parte, en la comparación entre los métodos de Strang y de Lawson, cuando $|\lambda||a|^2$ es suficientemente pequeña (siendo λ un parámetro real de la ecuación), todos los métodos se comportan de manera similar; pero, cuando $|\lambda||a|^2$ es más grande, los métodos de Strang se comportan mejor que los métodos proyectados de Lawson y, estos últimos, mejor que los no proyectados.

De cualquier modo también se sugiere una técnica de filtrado con el objeto de evitar inestabilidades numéricas en todos los métodos numéricos cuando el problema continuo es estable.

Este capítulo se estructura como sigue. En la sección 2 se dan algunos resultados preliminares acerca del problema continuo así como de los integradores numéricos considerados. En la sección 3 se justifica el comportamiento de todos los métodos considerados cuando se integra la onda plana exacta. Además se establecen los resultados precisos para todos los métodos considerados. En aras de una mayor claridad las pruebas han sido relegadas a un apéndice. La sección 4 contiene las diferentes regiones de estabilidad para los métodos de Strang y de Lawson correspondientes a $d = 1$. Finalmente, en la sección 5, se muestra la representación numérica de los distintos métodos para diferentes condiciones iniciales y diferentes tamaños de paso así como una sugerencia de la técnica para evitar inestabilidades.

3.2 Preliminares.

3.2.1 Problema Continuo.

Consideremos la ecuación

$$u_t = i\Delta u - i\lambda|u|^2u, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \quad (3.1)$$

con condiciones periódicas en un cierto intervalo, el cual, por simplicidad será $[0, 2\pi]$. Para este problema, según se deduce de los preliminares de la sección 0.1, los invariantes descritos allí son

$$H = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} (|u_x|^2 + \frac{\lambda}{2}|u|^4) dx,$$

$$\begin{aligned}
I_1 &= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} |u|^2 dx, \\
I_2 &= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \text{Im}(uu_x^*) dx.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Las soluciones para la onda plana tienen la siguiente forma

$$u(x, t) = ae^{i(kx - \omega t)}, \quad a \in \mathbb{C},$$

donde

$$\omega = k^2 + \lambda|a|^2. \tag{3.3}$$

Nos interesa conocer la estabilidad numérica cuando se integran estas soluciones pero resulta interesante primero conocer lo que ocurre en el caso continuo. Si

$$u_0 = a \left(1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{\epsilon}_l(0) e^{ilx} \right) e^{ikx}, \tag{3.4}$$

donde todos los $\hat{\epsilon}_l(0)$ se suponen pequeños, la solución exacta de (3.1) se puede escribir como

$$u(x, t) = ae^{i(kx - \omega t)} \left(1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \epsilon_l(t) e^{ilx} \right),$$

donde, despreciando los términos de orden superior a ϵ_l ,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \epsilon_l \\ \bar{\epsilon}_{-l} \end{pmatrix} = iG_l \begin{pmatrix} \epsilon_l \\ \bar{\epsilon}_{-l} \end{pmatrix}, \quad G_l = \begin{pmatrix} -l^2 - 2kl - \lambda|a|^2 & -\lambda|a|^2 \\ \lambda|a|^2 & l^2 - 2kl + \lambda|a|^2 \end{pmatrix}.$$

De lo anterior puede deducirse que $\epsilon_0(t) = \hat{\epsilon}_0(0)e^{-\lambda|a|^2 it}$, el cual permanece constante en módulo a lo largo del tiempo. Por otra parte, para $l \neq 0$, dado que los valores propios de iG_l son

$$(-2k \pm \sqrt{l^2 + 2\lambda|a|^2})il,$$

el modo correspondiente es inestable cuando

$$l^2 < -2\lambda|a|^2.$$

Por lo tanto, la inestabilidad solo puede ocurrir cuando $\lambda < 0$.

3.2.2 Descripción de los métodos.

Consideremos el método de splitting de Strang ya descrito en (2.11) donde, para nuestra ecuación, $\phi_t(u_I)$ denota la solución de

$$u_t = -i\lambda|u|^2u, \quad u(0) = u_I,$$

después del tiempo t . Obsérvese que, como ya hemos mencionado previamente, $|u|$ es un invariante de esta ecuación y, por lo tanto

$$\phi_t(u_I) = e^{-i\lambda t|u_I|^2}u_I.$$

Por otra parte, para cualquier valor distinto de cero del parámetro d , consideraremos el método exponencial de Lawson que se construye a partir del método de orden 2 de Runge-Kutta correspondiente al tablero de Butcher dado por

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ d & d & 0 \\ \hline & \frac{2d-1}{2d} & \frac{1}{2d} \end{array}. \quad (3.5)$$

(En los siguientes resultados nos centraremos principalmente en valores de d cercanos a $(0, 1]$, los cuales son los más importantes en la práctica). El método de Lawson [37] entonces se escribe, de acuerdo con (25)-(26), como sigue

$$\begin{aligned} K &= e^{idh\partial_{xx}}u_0 - dhi\lambda e^{idh\partial_{xx}}|u_0|^2u_0, \\ u_1 &= e^{ih\partial_{xx}}u_0 - hi\lambda\left[\frac{2d-1}{2d}e^{ih\partial_{xx}}|u_0|^2u_0 + \frac{1}{2d}e^{i(1-d)h\partial_{xx}}|K|^2K\right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

También consideraremos su proyección sobre la norma I_1 . Según el capítulo anterior, el método viene dado por

$$\tilde{u}_1 = \sqrt{\frac{\int |u_0|^2}{\int |u_1|^2}}u_1. \quad (3.7)$$

3.3 Resultados teóricos.

3.3.1 Comportamiento de los distintos métodos cuando se integra la onda plana.

Supongamos de momento que la condición inicial es la solución de la onda plana exacta sin perturbaciones

$$u_0 = ae^{ikx}.$$

Resulta fácil comprobar que el método de Strang produce la solución exacta después de un paso dado que

$$\begin{aligned} e^{it\partial_{xx}} e^{ikx} &= e^{i(kx-k^2t)}, \\ \phi_s(ae^{i(kx-k^2t)}) &= ae^{-i\lambda|a|^2s} e^{i(kx-k^2t)}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} u_1 &= e^{i\frac{h}{2}\partial_{xx}} \phi_h(ae^{i(kx-k^2\frac{h}{2})}) = e^{i\frac{h}{2}\partial_{xx}} (e^{-i\lambda h|a|^2} ae^{i(kx-k^2\frac{h}{2})}) \\ &= ae^{-i\lambda h|a|^2} e^{i(kx-k^2h)} = ae^{i(kx-h(k^2+\lambda|a|^2))} = ae^{i(kx-\omega h)}. \end{aligned}$$

Por otra parte, la solución numérica después de un paso de tamaño h con el método de Lawson viene dado por

$$u_1 = aAe^{i(kx-\omega h)}, \quad (3.9)$$

donde ω está dado por (3.3) y

$$A = e^{i\lambda|a|^2h} \left(1 - \frac{\lambda^2 h^2}{2} |a|^4 - \frac{\lambda^4 h^4}{2} d^2 |a|^8 - \lambda h i |a|^2 - \frac{\lambda^3 h^3 i}{2} d |a|^6\right). \quad (3.10)$$

Puede observarse que A difiere de 1 en

$$h^3 \lambda^3 |a|^6 i \left(\frac{d}{2} + \frac{1}{6}\right) + O(h^4), \quad (3.11)$$

lo cual corresponde a un error local comportándose como una $O(h^3)$ cuando $d \neq -\frac{1}{3}$ y conduce en general a un error global de orden 2 en la norma L^2 . No obstante,

$$|A| = 1 + \frac{1}{2} \lambda^4 h^4 |a|^8 (-d^2 + d + \frac{1}{4}) + O(h^6), \quad (3.12)$$

lo cual explica que el método muestre orden 3 en los invariantes I_1 , I_2 y H (3.2), teniendo en cuenta que

$$|u(t)|^2 = |a|^2, |u_1|^2 = |a|^2|A|^2, |u_x(t)|^2 = k^2|a|^2, |u_{1,x}|^2 = k^2|a|^2|A|^2, \\ u\bar{u}_x(t) = -ik|a|^2, u_1\bar{u}_{1,x} = -ik|a|^2|A|^2.$$

Esto se puede comprobar numéricamente en las Figuras 3.1 y 3.2 donde el error se representa frente al tiempo tomando $N = 10$ nodos en una discretización pseudoespectral en espacio y tamaños de paso de tiempo $h = 0.1, 0.01, 0.001$. Hemos considerado (3.1) con $\lambda = 1$ y condición inicial $u_0 = 0.5e^{ix}$. Se ha tomado como parámetro el valor $d = 1$.

Sin embargo, cuando se considera la proyección del método sobre la norma I_1 , ocurre que

$$\tilde{u}_1 = \sqrt{\frac{\int |u_0|^2}{\int |u_1|^2}} u_1 = \frac{1}{|A|} u_1 = a \frac{A}{|A|} e^{i(kx - \omega h)}.$$

De aquí, es claro que, con el método proyectado, no solo el error en la norma se anula sino también lo hacen los errores en el momento y el Hamiltoniano.

Además, con respecto a la estabilidad, obsérvese que la amplitud de la onda plana exacta, antes de proyectar y de acuerdo con (3.12), crece tras un paso en el tiempo cuando $d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2})$ para un valor suficientemente pequeño de h . Sin embargo, después de proyectar, eso no ocurre nunca más, lo cual parece sugerir que ‘proyectar’ va a ser beneficioso también para la estabilidad. El resultado que viene a continuación precisa más el comportamiento de la solución de onda plana perturbada.

3.3.2 Comportamiento de los diferentes métodos cuando se integra una onda plana perturbada.

Para estudiar la estabilidad numérica cuando se integra una onda plana perturbada (3.4), la solución después de un paso de tamaño h queda de la siguiente forma

$$u_1 = a \left(1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{\epsilon}_{l,1}(h) e^{ilx} \right) e^{i(kx - \omega h)}.$$

Después de n pasos consideraremos la siguiente notación

$$u_n = a \left(1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{\epsilon}_{l,n}(h) e^{ilx} \right) e^{i(kx - \omega n h)}.$$

Estamos interesados en observar el crecimiento de los coeficientes $\hat{\epsilon}_{l,n}(h)$ con respecto a $\hat{\epsilon}_l(0)$ y n , y diremos que la frecuencia l es estable si $\hat{\epsilon}_{l,n}(h)$ no crece con n .

Teorema 3.3.1 *Cuando se utiliza el **splitting de Strang**, descartando los términos que sean de orden cuadrático en la condiciones iniciales de las perturbaciones $\{\hat{\epsilon}_l(0)\}$,*

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{l,1}(h) \\ \hat{\epsilon}_{-l,1}(h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_l & C_l \\ C_{-l} & B_{-l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_l(0) \\ \hat{\epsilon}_{-l}(0) \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

donde

$$B_l = (1 - i\lambda h |a|^2) e^{-(2kl+l^2)hi}, \quad C_l = -i\lambda h |a|^2 e^{-2klhi}. \quad (3.14)$$

De aquí que,

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{l,n}(h) \\ \hat{\epsilon}_{-l,n}(h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_l & C_l \\ C_{-l} & B_{-l} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_l(0) \\ \hat{\epsilon}_{-l}(0) \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Lo que ocurre es que el módulo de todos los valores propios de la matriz en (3.13) son independientes de k y solo dependen de $\lambda h |a|^2$ y $l^2 h$. Además, cuando

$$|\cos(l^2 h) - \lambda h |a|^2 \sin(l^2 h)| < 1,$$

los valores propios son diferentes y tienen módulo 1, mientras que si

$$|\cos(l^2 h) - \lambda h |a|^2 \sin(l^2 h)| > 1,$$

uno de los valores propios tiene módulo > 1 . Aún más,

- Para $l = 0$, $\hat{\epsilon}_{0,n}$ satisface

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\hat{\epsilon}_{0,n}(h)) &= \operatorname{Re}(\hat{\epsilon}_0(0)), \\ \operatorname{Im}(\hat{\epsilon}_{0,n}(h)) &= \operatorname{Im}(\hat{\epsilon}_0(0)) - 2\lambda h |a|^2 n \operatorname{Re}(\hat{\epsilon}_0(0)). \end{aligned} \quad (3.16)$$

lo cual implica que la parte real de $\hat{\epsilon}_{0,n}$ permanece constante en cada paso mientras que la parte imaginaria crece linealmente si $\operatorname{Re}(\hat{\epsilon}_0(0)) \neq 0$, $\lambda \neq 0$ y $a \neq 0$.

- Para $l \neq 0$ y h suficientemente pequeño,
 - Para cualquier $\lambda > 0$, todas las frecuencias son estables dado que todos los valores propios de la matriz en (3.13) son diferentes y tienen módulo 1.
 - Para cualquier $\lambda < 0$, si $l^2 < -2\lambda|a|^2$, algunos valores propios de la matriz en (3.13) tiene módulo > 1 (de hecho $1 + O(h)$), lo cual hace que esas frecuencias sean inestables. Si $l^2 > -2\lambda|a|^2$, todos los valores propios son diferentes y tienen módulo 1 y, por lo tanto, son estables.

Comentario 3.3.2 Nótese que, para $k = 0$, las conclusiones acerca de la estabilidad para el método de Strang son las mismas que las obtenidas para el método de splitting de Lie en la sección 5.3 en [18], aunque la matriz en (3.13) no sea la misma.

Comentario 3.3.3 Es interesante observar que, para h suficientemente pequeño, la inestabilidad con el método de Strang solo tiene lugar cuando $\lambda < 0$ y $l^2 < -2\lambda|a|^2$, lo cual se corresponde con la inestabilidad del problema continuo.

Teorema 3.3.4 Cuando se utilizan los **métodos de Lawson** (3.6), descartando los términos que sean de orden cuadrático en la condiciones iniciales de las perturbaciones $\{\hat{\epsilon}_i(0)\}$, para $l \neq 0$, se tiene (3.13) con

$$B_l = (1 - 2\lambda h i |a|^2 - \lambda^3 h^3 i d |a|^6 - 2\lambda^2 h^2 |a|^4 - 2\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8) e^{-(l^2 + 2kl - \lambda|a|^2)hi} \\ + \left(\frac{1}{2}(\lambda^2 h^2 |a|^4 - \lambda^4 h^4 d^2 |a|^8) - i\lambda^3 h^3 d |a|^6\right) e^{((2d-1)l^2 - 2kl + \lambda|a|^2)hi}, \quad (3.17)$$

$$C_l = ((-\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8 - \lambda^2 h^2 |a|^4) - \frac{\lambda h i}{2d}(2d-1)|a|^2) e^{-(l^2 + 2kl - \lambda|a|^2)hi} \\ + (-\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8 - \frac{\lambda h i}{2d}(|a|^2 + 3\lambda^2 h^2 d^2 |a|^6)) e^{((2d-1)l^2 - 2kl + \lambda|a|^2)hi}. \quad (3.18)$$

Además, para $l = 0$,

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{0,1}(h) \\ \bar{\hat{\epsilon}}_{0,1}(h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_0 & C_0 \\ \bar{C}_0 & \bar{B}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_0(0) \\ \bar{\hat{\epsilon}}_0(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A-1 \\ A-1 \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

donde B_0 y C_0 se corresponden con (3.17) y (3.18) con $l = 0$ y A con (3.10). De ahí que, para $l \neq 0$ se verifique (3.15) de nuevo, mientras que para $l = 0$,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{0,n}(h) \\ \overline{\hat{\epsilon}_{0,n}(h)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} B_0 & C_0 \\ \bar{C}_0 & \bar{B}_0 \end{pmatrix}^n \left[\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_0(0) \\ \overline{\hat{\epsilon}_0(0)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1-B_0 & -C_0 \\ \bar{C}_0 & 1-\bar{B}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} A-1 \\ A-1 \end{pmatrix} \right] \\ &+ \begin{pmatrix} 1-B_0 & -C_0 \\ \bar{C}_0 & 1-\bar{B}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} A-1 \\ A-1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

donde el último término (o el segundo entre paréntesis) puede verse como una $O(h^2)$.

Ocurre que, para todas las frecuencias l , los valores propios de la matriz

$$\begin{pmatrix} B_l & C_l \\ \bar{C}_{-l} & \bar{B}_{-l} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

son independientes de k y solo dependen de $\lambda h|a|^2$, $h^2 l$ y obviamente d . Por otra parte, para h suficientemente pequeño,

- La frecuencia $l = 0$ es inestable para $d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}) \setminus \{0\}$ dado que en este caso todos los valores propios de la matriz elevada a n en (3.20) tiene módulo > 1 (aunque sea $1 + O(h^4)$).
- Para $l \neq 0$,
 - Siempre que $\lambda > 0$, si $d \in (-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}) \setminus \{0\}$, los valores propios de la matriz (3.21) tienen módulo < 1 para $l^2 \notin I$ con

$$I = (\max\{0, \lambda|a|^2(1 - \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}})\}, \lambda|a|^2(1 + \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}})) \quad (3.22)$$

mientras que para $l^2 \in I$, existe al menos un valor propio de módulo > 1 (de hecho es $1 + O(h^4)$).

- Siempre que $\lambda < 0$, si $2\lambda|a|^2 + l^2 < 0$, la frecuencia l es inestable dado que existe al menos un valor propio de la matriz (3.21) que tiene módulo > 1 (de hecho es $1 + O(h)$). Si $2\lambda|a|^2 + l^2 > 0$, los valores propios tienen módulo < 1 y la frecuencia es estable.

Comentario 3.3.5 *Nótese que, a diferencia del método de Strang, para h suficientemente pequeño, aparecen inestabilidades con los métodos de Lawson que no se corresponden con los del problema continuo. Sin embargo, en este caso, las inestabilidades son mucho más débiles que las correspondientes al caso continuo. (El módulo de los valores propios es $1 + O(h^4)$ frente a $1 + O(h)$). En la práctica, los primeros no significan una inestabilidad real.*

Teorema 3.3.6 *Cuando se utilizan los métodos proyectados de Lawson (3.7), descartando los términos que sean de orden cuadrático en las condiciones iniciales de las perturbaciones $\{\hat{\epsilon}_l(0)\}$, para $l \neq 0$,*

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{l,1}(h) \\ \hat{\epsilon}_{-l,1}(h) \end{pmatrix} = \frac{1}{|A|} \begin{pmatrix} B_l & C_l \\ \bar{C}_{-l} & \bar{B}_{-l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_l(0) \\ \hat{\epsilon}_{-l}(0) \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

donde A es la de (3.10) y B_l, C_l son las de (3.17)-(3.18). Además, para $l = 0$,

$$\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{0,1}(h) \\ \hat{\epsilon}_{0,1}(h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{B}_0 & \tilde{C}_0 \\ \bar{\tilde{C}}_0 & \bar{\tilde{B}}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_0(0) \\ \hat{\epsilon}_0(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{A}{|A|} - 1 \\ \frac{A}{|A|} - 1 \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

con

$$\begin{aligned} \tilde{B}_0 &= \frac{A}{2|A|} \left(1 - \frac{A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0}{|A|^2} \right) + \frac{B_0}{|A|}, \\ \tilde{C}_0 &= \frac{A}{2|A|} \left(1 - \frac{A\bar{B}_0 + \bar{A}C_0}{|A|^2} \right) + \frac{C_0}{|A|}. \end{aligned}$$

De aquí que, para $l \neq 0$ (3.15) sea válido de nuevo junto con el factor $1/|A|^n$, mientras que para $l = 0$,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \tilde{\hat{\epsilon}}_{0,n}(h) \\ \tilde{\hat{\epsilon}}_{0,n}(h) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \tilde{B}_0 & \tilde{C}_0 \\ \bar{\tilde{C}}_0 & \bar{\tilde{B}}_0 \end{pmatrix}^n \left[\begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_0(0) \\ \hat{\epsilon}_0(0) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 - \tilde{B}_0 & -\tilde{C}_0 \\ \bar{\tilde{C}}_0 & 1 - \bar{\tilde{B}}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{A}{|A|} - 1 \\ \frac{A}{|A|} - 1 \end{pmatrix} \right] \\ &+ \begin{pmatrix} 1 - \tilde{B}_0 & -\tilde{C}_0 \\ \bar{\tilde{C}}_0 & 1 - \bar{\tilde{B}}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{A}{|A|} - 1 \\ \frac{A}{|A|} - 1 \end{pmatrix}, \quad (3.25) \end{aligned}$$

donde se puede ver que el último término (o el segundo entre paréntesis) es una $O(h^2)$.

Ocurre que A y el módulo de los valores propios de la matrices en (3.23) y (3.24) son independientes de k y solo dependen de $\lambda h|a|^2$, h^2l y obviamente de d . Por otra parte, para h suficientemente pequeño,

- La frecuencia $l = 0$ es estable para $d > -\frac{1}{3}$ dado que la matriz en (3.24) tiene todos los valores propios con módulo < 1 .
- Para $l \neq 0$,
 - Para cualquier $\lambda > 0$, si $d \in (\frac{1-\sqrt{5}}{2}, \frac{1+\sqrt{5}}{2}) \setminus \{0\}$, los valores propios de

$$\frac{1}{|A|} \begin{pmatrix} B_l & C_l \\ \bar{C}_{-l} & \bar{B}_{-l} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

tienen módulo < 1 para $l^2 \notin \tilde{I}$ con

$$\tilde{I} = (\max\{0, \lambda|a|^2(1 - \sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}})\}, \lambda|a|^2(1 + \sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}})),$$

mientras que para $l^2 \in \tilde{I}$ existe al menos un valor propio de módulo > 1 (de hecho es $1 + O(h^4)$).

- Para cualquier $\lambda < 0$, si $2\lambda|a|^2 + l^2 < 0$, la frecuencia l es inestable dado que existe al menos un valor propio en (3.26) que tiene módulo > 1 (de hecho es $1 + O(h)$). Si $2\lambda|a|^2 + l^2 > 0$, esa frecuencia es estable dado que todos los valores propios tienen módulo < 1 .

Comentario 3.3.7 El método proyectado de Lawson ha mejorado la estabilidad para h suficientemente pequeño en el siguiente sentido. Por una parte, para $l = 0$, la débil inestabilidad que existía para $d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}) \setminus \{0\}$ ha desaparecido. Por otra parte, para $l \neq 0$ y $\lambda > 0$, siempre que

$$d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}) \subset (-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}) \subset (\frac{1 - \sqrt{5}}{2}, \frac{1 + \sqrt{5}}{2}),$$

el conjunto de valores $\{l^2\}$ para los cuales ocurre la inestabilidad disminuye dado que

$$\sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}} < \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}},$$

para esos valores de d . En cualquier caso, insistimos de nuevo en que la posible inestabilidad es muy débil dado que los módulos de los valores propios son $1 + O(h^4)$.

3.4 Regiones de estabilidad.

En esta sección observaremos cuándo aparece la inestabilidad numérica. No solo estamos interesados en lo que ocurre cuando $h \rightarrow 0$ para cada valor particular de l , sino en lo que ocurre para un problema en particular en que varias frecuencias son importantes y consideramos un valor de h particular suficientemente bueno para la consistencia de la integración numérica del problema.

Como se ha establecido en teoremas previos, para cada método considerado en este capítulo, la estabilidad o inestabilidad solo depende de los valores $h\lambda|a|^2$ y \sqrt{hl} para cada frecuencia y es independiente del valor de k de la condición inicial.

Por lo tanto, usando como coordenadas $x = h\lambda|a|^2$ y $y = \sqrt{hl}$, vamos a representar en el plano (x, y) un punto donde las matrices que determinan la estabilidad en los Teoremas 3.3.1, 3.3.4, 3.3.6 resultan tener un valor propio de módulo > 1.000001 según MATLAB. (Se ha escogido este valor en vez de 1 debido a la alta sensibilidad en los cálculos de los valores propios cerca de valores propios dobles y porque los valores propios que difieren, en módulo, de 1 menos que 0.000001 tardan bastante tiempo en mostrar su comportamiento inestable).

La Figuras 3.3, 3.4 y 3.5 muestran las regiones de estabilidad para los métodos de Strang, no proyectado de Lawson con $d = 1$ y proyectado de Lawson correspondiente a $d = 1$. En la zona considerada (la misma que en [18]), el método menos inestable es claramente el método de Strang mientras que el método proyectado de Lawson es más estable que el no proyectado al menos en $l = 0$, lo cual corrobora los resultados mostrados en secciones previas. Obsérvese también que la inestabilidad continua corresponde al interior de la parábola que se representa mediante línea roja discontinua.

Se podría pensar que todos estos métodos no son de utilidad en comparación con los implícitos considerados en [18], donde las regiones de inestabilidad son mucho más pequeñas. Sin embargo, ese no es el caso ya que, por una parte, estos métodos son mucho más baratos dado que son explícitos y, por otra parte, la restricción sobre el tamaño de paso por razones de consistencia conduce a considerar valores de $h\lambda|a|^2$ mucho más pequeños de 30. (Obsérvese, por ejemplo que, para la solución de onda plana exacta, el e-

ror de truncamiento local correspondiente al método no proyectado (3.11) depende directamente del cubo de dicha cantidad). Por ello, en las Figuras 3.6, 3.7 y 3.8, de nuevo se han representado las regiones de inestabilidad para los diferentes métodos pero en una ventana de valores $h\lambda|a|^2$ mucho más estrecha que antes. La conclusión es de nuevo clara. En esa ventana, la zona de inestabilidad para el método de Strang es bastante más pequeña que la que corresponde a los métodos proyectados y no proyectados de Lawson, fundamentalmente cuando $\lambda > 0$ y l es pequeño. La única clara mejora del método proyectado de Lawson frente al no proyectado es la que corresponde a la frecuencia $l = 0$. Además, observemos que, para valores suficientemente pequeños de h y $\lambda < 0$, las diferentes regiones de estabilidad concuerdan con la parábola que determina la estabilidad continua. Esto corrobora los resultados de las secciones previas. Más concretamente, los Teoremas 3.3.1, 3.3.4 y 3.3.6. De un modo similar, para los métodos sin proyectar y proyectados de Lawson, cuando $\lambda > 0$, las regiones de estabilidad concuerdan bastante bien con las parábolas $y^2 = 5x/2$ y $y^2 = (1 + \sqrt{2})x$ respectivamente, las cuales están representadas en línea discontinua en color magenta y corresponden a los extremos superiores de los intervalos I y \tilde{I} , los cuales determinan los valores de inestabilidad para $d = 1$ en los Teoremas 3.3.4 y 3.3.6. Remarcamos que en las Figuras 3.6, 3.7 y 3.8 no hay concordancia con tales parábolas para valores muy pequeños de h porque se dibuja en color oscuro solo los valores que conducen a valores propios de módulo $> 1 + 10^{-6}$. Como los mismos teoremas prueban, los módulos de los valores propios en la zona interior de la parábola son $1 + O(h^4)$ y, por lo tanto, para valores muy pequeños de h , el programa no los dibuja dentro de la zona de inestabilidad. De hecho, la inestabilidad tardaría mucho en aparecer.

La siguiente sección está dedicada a explicar cómo evitar, en cualquier caso, las inestabilidades correspondientes a las frecuencias más altas.

3.5 Evitando inestabilidades.

En esta sección, se muestra cómo evitar inestabilidades numéricas cuando se integran soluciones perturbadas de onda plana de la ecuación de Schrödinger que satisfacen que, o bien son regulares, o presentan un pequeño pero incómodo ruido. Para ello necesitamos tener una región de estabilidad para el corres-

pondiente método que contenga un pequeño rectángulo centrado en $(0, 0)$ en las variables $(h\lambda|a|^2, h^{1/2}l)$ excepto para los puntos interiores a la parábola que determina la estabilidad continua. Nótese que, para el método de Strang y los métodos sin proyectar y proyectados de Lawson de la sección anterior, podríamos considerar, al menos, un rectángulo de altura 2×1.5 y 2×0.025 de anchura.

Obsérvese que nuestro problema (3.1) está muy bien ajustado mediante la discretización pseudoespectral de modo que el error en espacio puede considerarse despreciable. Hemos integrado el problema (3.1) con $\lambda = 1$ y condición inicial

$$u_0 = 0.5(1 + 0.1x^7(2\pi - x)^7/\pi^{14}),$$

la cual es una perturbación regular de la solución de onda plana correspondiente a $a = 0.5$ y $k = 0$. Cuando se consideran $N = 100$ nodos en espacio y tamaños de paso para el tiempo de $h = 0.1, 0.01, 0.001$, medimos el error en el Hamiltoniano y lo representamos frente al tiempo en la Figura 3.9 para los diferentes métodos considerados. Es evidente para todos los métodos la inestabilidad que ocurre cuando $h = 0.1$ pero que desaparece cuando h disminuye. Para $l \neq 0$, esto está de acuerdo con los Teoremas 3.3.4 y 3.3.6, dado que

$$\lambda|a|^2\left(1 + \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}}\right) = 5/8, \quad \lambda|a|^2\left(1 + \sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}}\right) = \frac{1 + \sqrt{2}}{4},$$

en nuestro problema y no existe valor de l^2 con $l \neq 0$ natural menor que cualquiera de esos dos valores.

En la Figura 3.10, representamos el máximo de los valores absolutos de los valores propios de las matrices que determinan la estabilidad para $l = 0, 1, \dots, 50$, para los diferentes métodos cuando $a = 0.5$, $\lambda = 1$ and $h = 0.1$. (De nuevo han sido calculados con MATLAB). Es claro que para todos los métodos ese valor máximo es, fundamentalmente, 1 salvo para $l = 0$. Para el método de Strang obtenemos un valor máximo absoluto de $\sim 1 + 2 \times 10^{-12}$ mientras que con el método no proyectado de Lawson es de $\sim 1 + 2 \times 10^{-7}$ y de $\sim 1 + 9 \times 10^{-15}$ con el método proyectado de Lawson. Hay una mejora aquí para el método proyectado de Lawson tal y como podría esperarse de acuerdo con el Teorema 3.3.6. No obstante, lo causa de la inestabilidad para

los tres métodos es solo la frecuencia $l = 35$ en el rango $[0 : 1 : 50]$. Incluso para el método no proyectado de Lawson, la estabilidad numérica en $l = 0$ es tan débil que no se aprecia en los experimentos. Para otros valores de $h = 0.01, 0.001$, el máximo es siempre fundamentalmente menor que 1 para ese rango de frecuencias.

Para una mejor comparación entre los tres métodos considerados en este capítulo, para el mismo problema, hemos tomado

$$u_0 = 2(1 + 0.1x^7(2\pi - x)^7/\pi^{14}),$$

lo cual solo significa cambiar el valor de a a $a = 2$. De esta forma,

$$\lambda|a|^2\left(1 + \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}}\right) = 10, \quad \lambda|a|^2\left(1 + \sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}}\right) = 4(1 + \sqrt{2}),$$

de modo que para los métodos no proyectado y proyectado de Lawson existen valores de $l \neq 0$ que conducen a inestabilidad numérica para valores pequeños de h cuando $\lambda > 0$. Además, aunque el módulo de uno de los valores propios es solo $1 + O(h^4)$, la constante en $O(h^4)$ tendrá un término de la forma $C\lambda^4|a|^8$ para algunas constantes moderadas C . El hecho de que $\lambda = 1$ y $a = 2$ hace que ese término no sea despreciable al menos para valores no demasiado pequeños de h . Lo mismo ocurre con la inestabilidad en $l = 0$ para el método no proyectado de Lawson. De hecho, para $h = 0.1$, el máximo en módulo de los valores propios se calcula con MATLAB y resulta ser $\sim 1 + 3 \times 10^{-2}$ mientras que vale $\sim 1 + 3 \times 10^{-7}$ para $h = 0.01$. Sin embargo, con el método proyectado de Lawson, ese valor resulta ser exactamente 1 para $h = 0.1$ y $\sim 1 + 2 \times 10^{-15}$ para $h = 0.01$. Para el método de Strang vale $\sim 1 + 8 \times 10^{-9}$ para $h = 0.1$ y $\sim 1 + 2 \times 10^{-9}$ para $h = 0.01$.

En la Figura 3.11 se muestran los errores con los tres métodos, tal y como antes se hizo. Todos los métodos muestran inestabilidades aunque el método no proyectado de Lawson resulta ser el peor en el sentido de que no es capaz de producir resultado alguno en la aritmética de punto flotante con $h = 0.1$.

El máximo de los módulos de los valores propios se representa en la Figura 3.12 para $h = 0.1$ y $h = 0.01$ donde las frecuencias que producen inestabilidades se pueden ver para todos los casos. Excepto para $l = 0$, ese número de frecuencias es muy similar para los métodos no proyectados y proyectados

de Lawson. Sin embargo, con el método de Strang son menos las frecuencias que causan inestabilidad.

Lo que sugerimos en esta sección, de cara a evitar posibles inestabilidades en los métodos de Strang y no proyectados y proyectados de Lawson, es lo siguiente: En cada paso, cuando

$$\sqrt{h}|l| > 1.5, \quad (3.27)$$

si denotamos por $C_n(l)$ el coeficiente correspondiente a la l -ésima frecuencia de la discretización pseudoespectral en el paso n , siempre que $|C_{n+1}(l)| > 1.000001|C_n(l)|$, cambiamos $C_{n+1}(l)$ a

$$\bar{C}_{n+1}(l) = C_{n+1}(l) \frac{|C_n(l)|}{|C_{n+1}(l)|},$$

de modo que el coeficiente correspondiente a esa frecuencia no puede crecer con el tiempo en módulo. Eso es exactamente lo que ocurre cuando la situación se corresponde con la estabilidad del caso continuo. Además, dado que no se están cambiando los coeficientes de las frecuencias más pequeñas del problema para valores pequeños de h a causa de (3.27), la consistencia del método no se altera para perturbaciones regulares. (Esto se debe al hecho de que los coeficientes de las frecuencias más grandes son mucho más pequeñas que los de las frecuencias más pequeñas y, por lo tanto, son las que importan). Los resultados correspondientes después del filtrado se representan en la Figura 3.13 para $a = 0.5$ y en la Figura 3.14 para $a = 2$. Para $a = 0.5$, la mejora es clara con todos los métodos. No obstante, para $a = 2$ y $h = 0.1$ el método no proyectado de Lawson no logra obtener una solución y, con el método proyectado de Lawson, los errores son todavía muy malos. (La razón para ello es que en ese caso $h\lambda|a|^2 = 0.4$, de modo que no estamos en la zona ‘rectangular’ de estabilidad que fue mencionada al principio de la sección). Sin embargo, para el método de Strang y todos los tamaños de paso considerados y para los métodos de Lawson con el resto de valores h , los errores son ya muy aceptables.

3.6 Apéndice A. Prueba del Teorema 3.3.1.

Considerando la forma particular de u_0 (3.4) junto con (3.8),

$$e^{i\frac{h}{2}\partial_{xx}}u_0 = a\left[e^{i(kx-k^2\frac{h}{2})} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{i[(k+l)x-(k+l)^2\frac{h}{2}]}\right].$$

De aquí, despreciando términos de orden superior en los pequeños coeficientes $\hat{e}_l(0)$,

$$|e^{i\frac{h}{2}\partial_{xx}}u_0|^2 \approx |a|^2 \left[1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{ilx}e^{-(2kl+l^2)\frac{h}{2}} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \overline{\hat{e}_{-l}(0)}e^{ilx}e^{(-2kl+l^2)\frac{h}{2}}\right].$$

Entonces,

$$\begin{aligned} & \Psi_h(e^{i\frac{h}{2}\partial_{xx}}u_0) \\ & \approx ae^{-i\lambda h|a|^2} \left[1 - i\lambda h|a|^2 \left[\sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{ilx}e^{-(2kl+l^2)\frac{h}{2}} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \overline{\hat{e}_{-l}(0)}e^{ilx}e^{(-2kl+l^2)\frac{h}{2}} \right] \right. \\ & \quad \cdot \left. \left[e^{i(kx-k^2\frac{h}{2})} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{i[(k+l)x-(k+l)^2\frac{h}{2}]} \right] \right] \\ & \approx ae^{-i\lambda h|a|^2} \left[e^{i(kx-k^2\frac{h}{2})} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{i[(k+l)x-(k+l)^2\frac{h}{2}]} \right. \\ & \quad \left. - i\lambda h|a|^2 \left[\sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{i[(k+l)x-(k+l)^2\frac{h}{2}]} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \overline{\hat{e}_{-l}(0)}e^{i[(k+l)x-\frac{h}{2}(k^2+2kl-l^2)]} \right] \right]. \end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} u_1 = & ae^{i(kx-(k^2+\lambda|a|^2)h)} \left[1 + (1 - i\lambda h|a|^2) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{e}_l(0)e^{-(2kl+l^2)hi} e^{ilx} \right. \\ & \left. - i\lambda h|a|^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \overline{\hat{e}_{-l}(0)}e^{-2klhi} e^{ilx} \right], \end{aligned}$$

de donde, despreciando términos de orden superior en $\{\hat{e}_l(0)\}$, se deduce (3.13) con B_l y C_l en (3.14). Para estudiar los valores propios de esta matriz debemos estudiar las raíces de

$$z^2 - (B_l + \overline{B_{-l}})z + B_l\overline{B_{-l}} - C_l\overline{C_{-l}}.$$

Simple cálculos conducen a

$$\begin{aligned} B_l + \overline{B_{-l}} &= 2e^{-2klhi}[\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h)], \\ B_l \overline{B_{-l}} - C_l \overline{C_{-l}} &= e^{-4klhi}, \end{aligned}$$

de donde los valores propios de la matriz en (3.13) son las raíces de

$$\left[\frac{z}{e^{-2klhi}} \right]^2 - 2[\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h)] \left[\frac{z}{e^{-2klhi}} \right] + 1 = 0.$$

Se deduce fácilmente de aquí que cuando

$$|\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h)| < 1,$$

ambas raíces son diferentes y tienen módulo 1 lo cual implica que las perturbaciones sobre los correspondientes coeficientes se propagan. Pero, cuando

$$|\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h)| > 1,$$

una de las raíces tendrá módulo > 1 y, por lo tanto, la correspondiente perturbación se propagará de un modo inestable. Finalmente, cuando

$$\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h) = 1 \quad \text{o} \quad \cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h) = -1,$$

las dos raíces son la misma y tienen módulo 1. Sin embargo, la matriz no diagonaliza si $a \neq 0$ y $\lambda \neq 0$, de modo que la n -ésima potencia de la matriz en (3.13) crece linealmente. Este caso corresponde, por ejemplo, a la frecuencia $l = 0$, para la cual se deduce más precisamente la fórmula (3.16).

Por otra parte, para $l \neq 0$, considerando el desarrollo asintótico en h ,

$$\cos(l^2h) - \lambda h|a|^2 \sin(l^2h) = 1 - l^2 h^2 \left(\frac{l^2}{2} + \lambda |a|^2 \right) + O(h^4),$$

de donde, para valores de h suficientemente pequeños, si $\lambda > 0$, el valor absoluto de este es siempre < 1 y todas las frecuencias son estables. Sin embargo, si $\lambda < 0$, siempre que $l^2 < -2\lambda|a|^2$, el valor absoluto es > 1 y la correspondiente frecuencia es inestable. Obsérvese también que, para ser más preciso, en el caso inestable una de las raíces satisface

$$\frac{z}{e^{-2klhi}} = 1 + h|l| \sqrt{-l^2 - 2\lambda|a|^2} + O(h^2). \quad (3.28)$$

con lo cual el teorema queda probado. \square

3.7 Apéndice B. Prueba del Teorema 3.3.4.

Solo es cuestión de paciencia deducir de (3.6) que, cuando u_0 es de la forma (3.4), después de despreciar términos de orden superior en $\{\hat{\epsilon}_l(0)\}$,

$$\begin{aligned}
 K &\approx a(1 - \lambda h i d |a|^2) e^{i(kx - k^2 dh)} + a(1 - 2\lambda h i d |a|^2) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{\epsilon}_l(0) e^{i[(l+k)x - (l+k)^2 dh]} \\
 &\quad - \lambda h i d |a|^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \overline{\hat{\epsilon}_l(0)} e^{i[(k-l)x - (k-l)^2 dh]}, \\
 u_1 &\approx a \left[A + \sum_{l=-\infty}^{\infty} B_l \hat{\epsilon}_l(0) e^{ilx} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} C_l \overline{\hat{\epsilon}_{-l}(0)} e^{ilx} \right] e^{i(kx - \omega h)}, \tag{3.29}
 \end{aligned}$$

donde B_l y C_l son las de (3.17)-(3.18).

De aquí que, excepto para términos de orden superior en $\{\hat{\epsilon}_l(0)\}$, para $l \neq 0$, se tenga (3.13) y (3.15) con B_l y C_l en (3.17)-(3.18). Más aún, para $l = 0$, se satisfacen (3.19) y (3.20) donde el último término (o el segundo entre paréntesis) puede considerarse una $O(h^2)$.

De (3.17) y (3.18),

$$B_0 = \left(1 - \frac{3}{2} \lambda^2 h^2 |a|^4 - \frac{5}{2} \lambda^4 h^4 d^2 |a|^8 + i(-2\lambda h |a|^2 - 2\lambda^3 h^3 d |a|^6) \right) e^{\lambda |a|^2 h i} \tag{3.30}$$

$$C_0 = \left(-\lambda^2 h^2 |a|^4 - 2\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8 - i(\lambda h |a|^2 + \frac{3}{2} \lambda^3 h^3 d |a|^6) \right) e^{\lambda |a|^2 h i}. \tag{3.31}$$

Ahora, tendremos en cuenta que, mediante los correspondientes cálculos,

$$B_0 \bar{B}_0 - C_0 \bar{C}_0 = 1 + \left(\frac{5}{4} - 5d^2 + 5d \right) \lambda^4 h^4 |a|^8 - \frac{13}{4} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + \frac{9}{4} \lambda^8 h^8 d^4 |a|^{16}, \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned}
 B_0 + \bar{B}_0 &= (2 - 3\lambda^2 h^2 |a|^4 - 5\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8) \cos(\lambda |a|^2 h) \\
 &\quad + (4\lambda h |a|^2 + 4\lambda^3 h^3 d |a|^6) \sin(\lambda |a|^2 h) \\
 &= 2 + (-5d^2 + 4d + \frac{11}{12}) \lambda^4 h^4 |a|^8 + O(h^6), \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

de donde

$$(B_0 + \bar{B}_0)^2 - 4(B_0 \bar{B}_0 - C_0 \bar{C}_0) = (10d^2 - 12d - \frac{19}{6}) \lambda^4 h^4 |a|^8 + O(h^6).$$

Aquí la expresión entre paréntesis del término para $O(h^4)$ es una parábola en d que toma valores negativos en $(\frac{3}{5} - \frac{\sqrt{609}}{30}, \frac{3}{5} + \frac{\sqrt{609}}{30}) \supset (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2})$,

lo cual implica que los valores propios de la matriz en (3.19) son complejos conjugados. Ahora, si $d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2})$, la expresión entre paréntesis en el término para $O(h^4)$ en (3.32) es una parábola que resulta positiva en el intervalo mencionado, lo cual prueba que el módulo de los valores propios es > 1 para valores de h suficientemente pequeños.

Por otro lado, para $l \neq 0$, y haciendo los correspondientes cálculos, se tiene que

$$\begin{aligned} B_l + \overline{B_{-l}} &= e^{-2klhi} [2(1 - 2\lambda^2 h^2 |a|^4 - 2\lambda^4 h^4 d^2 |a|^8) \cos((l^2 - \lambda|a|^2)h) \\ &\quad - 2(2\lambda h |a|^2 + \lambda^3 h^3 d |a|^6) \sin((l^2 - \lambda|a|^2)h) \\ &\quad + (\lambda^2 h^2 |a|^4 - \lambda^4 h^4 d^2 |a|^8) \cos((2d-1)l^2 + \lambda|a|^2)h) \\ &\quad + 2\lambda^3 h^3 d |a|^6 \sin((2d-1)l^2 + \lambda|a|^2)h)]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_l \overline{B_{-l}} - C_l \overline{C_{-l}} &= e^{-4klhi} \left[1 - \frac{4d^2 - 4d + 2}{4d^2} \lambda^2 h^2 |a|^4 + \left(\frac{7}{4} - 4d^2 + 4d\right) \lambda^4 h^4 |a|^8 \right. \\ &\quad + \frac{21}{4} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + \frac{9}{4} \lambda^8 h^8 d^4 |a|^{16} \\ &\quad + \left[\frac{4d^2 - 4d + 2}{4d^2} \lambda^2 h^2 |a|^4 + \left(d - d^2 - \frac{1}{2}\right) \lambda^4 h^4 |a|^8 \right] \cos(2dl^2 h) \\ &\quad \left. - \frac{4d - 4d^2 - 2}{2d} \lambda^3 h^3 |a|^6 \sin(2dl^2 h) \right]. \end{aligned}$$

Obsérvese que los términos entre paréntesis no dependen de k , solo de d , $l^2 h$ y $\lambda h |a|^2$. Desarrollándolo hasta términos en $O(h^4)$, los valores propios de (3.21) satisfacen

$$\frac{z}{e^{-2klhi}} \approx 1 - (\lambda l^2 |a|^2 + \frac{l^4}{2}) h^2 \pm \sqrt{1 - (2\lambda l^2 |a|^2 + l^4) h^2 - 1}. \quad (3.34)$$

Ahora, si $2\lambda |a|^2 + l^2 > 0$, para valores de h suficientemente pequeños,

$$\frac{z}{e^{-2klhi}} \approx 1 - (\lambda l^2 |a|^2 + \frac{l^4}{2}) h^2 \pm i \sqrt{2\lambda |a|^2 l^2 + l^4} h,$$

que tiene módulo 1 salvo por una $O(h^4)$. Dado que esto es solo una aproximación del valor propio, debemos considerar al menos también los términos en $O(h^4)$ para debatir la estabilidad. Además, resulta obvio que, en este caso de raíces complejas conjugadas, el cuadrado del módulo de esas raíces será

$$\frac{B_l \overline{B_{-l}} - C_l \overline{C_{-l}}}{e^{-4klhi}}.$$

Puede probarse que el coeficiente de h^4 en esta expresión, salvo por el factor $\lambda^2|a|^4$, es

$$-(2d^2 - 2d + 1)l^4 - (4d - 4d^2 - 2)l^2\lambda|a|^2 + \left(\frac{5}{4} - 5d^2 + 5d\right)\lambda^2|a|^4.$$

Esto puede interpretarse como una parábola en la variable $x = l^2$,

$$-(2d^2 - 2d + 1)x^2 - (4d - 4d^2 - 2)x\lambda|a|^2 + \left(\frac{5}{4} - 5d^2 + 5d\right)\lambda^2|a|^4, \quad (3.35)$$

la cual presenta su máximo en $x = \lambda|a|^2$.

Cuando $\lambda > 0$, este valor es positivo. Ahí, la parábola toma el valor $(-3d^2 + 3d + \frac{9}{4})\lambda^2|a|^4$. Se puede demostrar que este número es positivo cuando $d \in (-\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$. Además, para esos valores de d , la parábola se anula en

$$x = \lambda|a|^2 \left[1 \pm \sqrt{\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}} \right].$$

Como la función

$$\frac{-3d^2 + 3d + \frac{9}{4}}{2d^2 - 2d + 1}$$

toma valores entre 0 y 6 dependiendo del valor concreto de d , los valores de l que conducen a valores propios de módulo > 1 , para valores de h suficientemente pequeños, son aquéllos que yacen en el rango $l^2 \in I$, con I de (3.22). Cuando $\lambda < 0$, la abscisa del máximo de la parábola, $x = \lambda|a|^2$, es negativa. Además, el valor de esta parábola en $x = -2\lambda|a|^2 > 0$ puede comprobarse que es

$$\lambda^2|a|^4 \left[-21d^2 + 21d - \frac{27}{4} \right],$$

lo cual se comprueba que es negativo para cada valor real de d . De aquí, la parábola siempre será negativa para $x > -2\lambda|a|^2$, lo que implica que, para valores de h suficientemente pequeños, los valores propios de la matriz estudiada tienen módulo < 1 para $l^2 > -2\lambda a^2$.

Por otro lado, si $2\lambda|a|^2 + l^2 < 0$, de (3.34),

$$\frac{z}{e^{-2klhi}} \approx 1 - \left(\lambda^2|a|^2 + \frac{l^4}{2} \right) h^2 \pm \sqrt{-(2\lambda|a|^2 l^2 + l^4)} h, \quad (3.36)$$

y por lo tanto, para valores de h suficientemente pequeños, siempre hay un valor propio de módulo > 1 . \square

3.8 Apéndice C. Prueba del Teorema 3.3.6.

Nótese que, cuando u_0 tiene la forma de (3.4), si usamos (3.29), el método proyectado de Lawson después de un paso es

$$\tilde{u}_1 = \sqrt{\frac{\int |u_0|^2}{\int |u_1|^2}} u_1 = \sqrt{\frac{1 + \hat{\epsilon}_0(0) + \overline{\hat{\epsilon}_0(0)}}{|A|^2 + (A\bar{B}_0 + \bar{A}C_0)\hat{\epsilon}_0(0) + (A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0)\overline{\hat{\epsilon}_0(0)}}} u_1 \quad (3.37)$$

De aquí, obsérvese que

$$\tilde{u}_1 = a \left(1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{\hat{\epsilon}}_{l,1}(h) e^{ilx} \right) e^{ik(x-\omega h)},$$

donde, despreciando términos de orden superior en $\hat{\epsilon}_l(0)$,

$$\begin{pmatrix} \tilde{\hat{\epsilon}}_{0,1}(h) \\ \tilde{\hat{\epsilon}}_{0,1}(h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{B}_0 & \tilde{C}_0 \\ \tilde{C}_0 & \tilde{B}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_0(0) \\ \hat{\epsilon}_0(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{A}{|A|} - 1 \\ \frac{A}{|A|} - 1 \end{pmatrix},$$

con

$$\begin{aligned} \tilde{B}_0 &= \frac{A}{2|A|} \left(1 - \frac{A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0}{|A|^2} \right) + \frac{B_0}{|A|}, \\ \tilde{C}_0 &= \frac{A}{2|A|} \left(1 - \frac{A\bar{B}_0 + \bar{A}C_0}{|A|^2} \right) + \frac{C_0}{|A|}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Entonces, del mismo modo que en (3.20), puede deducirse (3.25) donde el último término (o el segundo término entre paréntesis) es una $O(h^2)$.

Mediante los correspondientes cálculos, puede demostrarse que

$$\begin{aligned} \tilde{B}_0 \bar{\tilde{B}}_0 - \tilde{C}_0 \bar{\tilde{C}}_0 &= \frac{1}{|A|^4} \left[|B_0|^2 |A|^2 - |C_0|^2 |A|^2 + \operatorname{Re}(A\bar{B}_0(|A|^2 - A\bar{C}_0 - \bar{A}B_0)) \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{Re}(A\bar{C}_0(|A|^2 - A\bar{B}_0 - \bar{A}C_0)) \right]. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Pero de (3.10), (3.30) y (3.31),

$$\begin{aligned} |A|^2 &= 1 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{1}{4} - d^2 + d \right) - \frac{1}{4} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + O(h^8), \\ |B_0|^2 &= 1 + \lambda^2 h^2 |a|^4 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{9}{4} - 5d^2 + 8d \right) + \frac{23}{2} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + O(h^8), \\ |C_0|^2 &= \lambda^2 h^2 |a|^4 + \lambda^4 h^4 |a|^8 (1 + 3d) + \frac{25}{4} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + O(h^8), \end{aligned}$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned}
|A|^2|B_0|^2 &= 1 + \lambda^2 h^2 |a|^4 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{5}{2} - 6d^2 + 9d \right) + \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{1}{4} - \frac{41}{4} d^2 + d \right) + O(h^8), \\
|A|^2|C_0|^2 &= \lambda^2 h^2 |a|^4 + \lambda^4 h^4 |a|^8 (1 + 3d) + \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{21}{4} d^2 + d + \frac{1}{4} \right) + O(h^8), \\
A\bar{C}_0 &= \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{1}{2} - 2d^2 + 2d \right) + \frac{9}{4} \lambda^6 h^6 d^2 a^{12} + \lambda^8 h^8 d^4 |a|^{16} \\
&\quad + i[\lambda h |a|^2 + \frac{1}{2} \lambda^3 h^3 |a|^6 (1 + 3d) + \frac{\lambda^5 h^5 |a|^{10}}{2} \left(-\frac{1}{2} d + 3d^2 \right) + \frac{1}{4} \lambda^7 h^7 d^3 a^{14}], \\
\bar{A}B_0 &= 1 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(-3d^2 + \frac{3}{4} + 3d \right) + \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{9}{4} d^2 + \frac{3}{4} \right) + \frac{5}{4} \lambda^8 h^8 d^4 |a|^{16} \\
&\quad - i[\lambda h |a|^2 + \frac{1}{2} \lambda^3 h^3 |a|^6 (1 + 3d) + \frac{\lambda^5 h^5 |a|^{10}}{2} \left(-\frac{1}{2} d + 3d^2 \right) + \frac{1}{4} \lambda^7 h^7 d^3 a^{14}].
\end{aligned}$$

De aquí,

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(A\bar{B}_0(|A|^2 - A\bar{C}_0 - \bar{A}B_0)) &= \lambda^4 h^4 |a|^8 (-1 + 4d^2 - 4d) - \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{19}{4} d^2 + \frac{3}{4} \right) + O(h^8), \\
\operatorname{Re}(A\bar{C}_0(|A|^2 - A\bar{B}_0 - \bar{A}C_0)) &= O(h^8),
\end{aligned}$$

lo cual significa que el término entre paréntesis en (3.39) es

$$1 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{1}{2} + 2d - 2d^2 \right) - \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{21}{4} d^2 + \frac{3}{4} \right) + O(h^8).$$

Finalmente, como

$$|A|^4 = 1 + 2\lambda^4 h^4 |a|^8 \left(-d^2 + d + \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{2} \lambda^6 h^6 d^2 |a|^{12} + O(h^8),$$

se deduce que

$$\tilde{B}_0 \bar{\tilde{B}}_0 - \tilde{C}_0 \bar{\tilde{C}}_0 = 1 - \lambda^6 h^6 |a|^{12} \left(\frac{19}{4} d^2 + \frac{3}{4} \right) + O(h^8). \quad (3.40)$$

Dado que el coeficiente de h^6 siempre es negativo, esto implica que el producto de los valores propios de la correspondiente matriz es siempre menor que 1 para valores de h suficientemente pequeños, independientemente de los valores de λ y d .

Sin embargo, de (3.38),

$$\tilde{B}_0 + \bar{\tilde{B}}_0 = \operatorname{Re} \left(\frac{A}{|A|} \left(1 - \frac{A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0}{|A|^2} \right) \right) + \frac{B_0 + \bar{B}_0}{|A|}. \quad (3.41)$$

Ahora, dado que $A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0$ es real y de (3.10) se deduce que $\operatorname{Re}(A) = 1 + O(h^4)$, se puede obtener fácilmente de las expresiones de la página anterior que

$$\operatorname{Re}\left(\frac{A}{|A|}\left(1 - \frac{A\bar{C}_0 + \bar{A}B_0}{|A|^2}\right)\right) = -\lambda^4 h^4 |a|^8 (1 - 4d^2 + 4d) + O(h^6). \quad (3.42)$$

También de (3.30),

$$B_0 + \bar{B}_0 = 2 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{11}{12} - 5d^2 + 4d\right) + O(h^6),$$

lo cual implica que

$$\frac{B_0 + \bar{B}_0}{|A|} = 2 + \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{2}{3} - 4d^2 + 3d\right) + O(h^6),$$

y finalmente utilizando esto en (3.41) junto con (3.42),

$$\tilde{B}_0 + \bar{\tilde{B}}_0 = 2 - \lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{1}{3} + d\right) + O(h^6).$$

Por lo tanto, usando también (3.40), sucede que

$$(\tilde{B}_0 + \bar{\tilde{B}}_0)^2 - 4(\tilde{B}_0 \bar{\tilde{B}}_0 - \tilde{C}_0 \bar{\tilde{C}}_0) = -4\lambda^4 h^4 |a|^8 \left(\frac{1}{3} + d\right) + O(h^6).$$

Por lo tanto, el coeficiente de h^4 en esta expresión es negativo para $d > -\frac{1}{3}$ y, por lo tanto, los valores propios de la matriz correspondiente son complejos conjugados y, por (3.40), tienen módulo < 1 .

Ahora, para $l \neq 0$, se deduce claramente (3.23) y se debe estudiar el módulo de los valores propios de (3.21) divididos por $|A|$.

De la prueba del Teorema 3.3.4, en el caso de raíces complejas conjugadas ($2\lambda|a|^2 + l^2 > 0$), tenemos que multiplicar el cuadrado del módulo de esas raíces por $1/|A|^2$, el cual es $1 - \lambda^4 h^4 |a|^8 (-d^2 + d + \frac{1}{4})$. De esta manera, el coeficiente de h^4 en esa expresión, salvo por el factor $\lambda^2 |a|^4$, es

$$-(2d^2 - 2d + 1)l^4 - (4d - 4d^2 - 2)l^2 \lambda |a|^2 + (1 - 4d^2 + 4d)\lambda^2 |a|^4. \quad (3.43)$$

De nuevo puede interpretarse esto como una parábola en la variable $x = l^2$, la cual alcanza su máximo en $x = \lambda|a|^2$.

Cuando $\lambda > 0$, la abscisa del máximo es > 0 . Ese máximo resulta ser $(-2d^2 + 2d + 2)\lambda^2|a|^4$, el cual es positivo cuando $d \in (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{5}}{2}, \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2})$. Por otro lado, en el último caso, la parábola se anula en

$$\lambda|a|^2\left(1 \pm \sqrt{\frac{-2d^2 + 2d + 2}{2d^2 - 2d + 1}}\right),$$

de donde se sigue el resultado en el intervalo \tilde{I} .

Cuando $\lambda < 0$, la abscisa del máximo es < 0 . Ahora, el valor de la parábola en $x = -2\lambda|a|^2 > 0$ resulta ser

$$\lambda^2|a|^4(-20d^2 + 20d - 7),$$

el cual es negativo para todo valor real de d . Esto implica que, para $l^2 > -2\lambda|a|^2$, los valores propios tienen módulo < 1 para valores de h suficientemente pequeños. Por otro lado, para $l^2 < -2\lambda|a|^2$, hay al menos un valor propio de módulo > 1 considerando (3.36) en la demostración del Teorema 3.3.4 y el hecho de que el módulo > 1 allí es debido a un término que es una $O(h)$ y no una $O(h^4)$, como es la diferencia entre 1 y $1/|A|$. \square

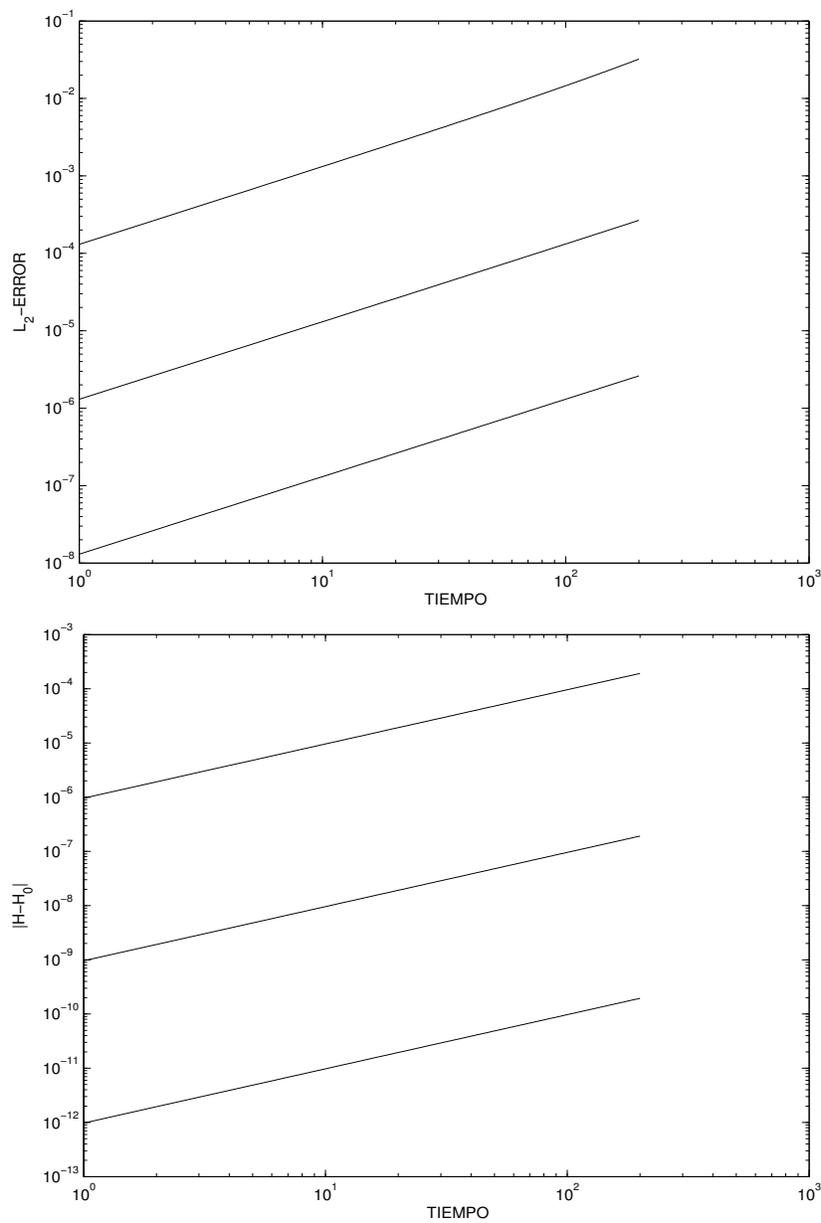


Figura 3.1: Error frente al tiempo para el método no proyectado de Lawson ($d = 1$) cuando se integra una onda plana exacta con $h = 0.1, 0.01, 0.001$: Error en L^2 (arriba), Error en el Hamiltoniano (abajo).

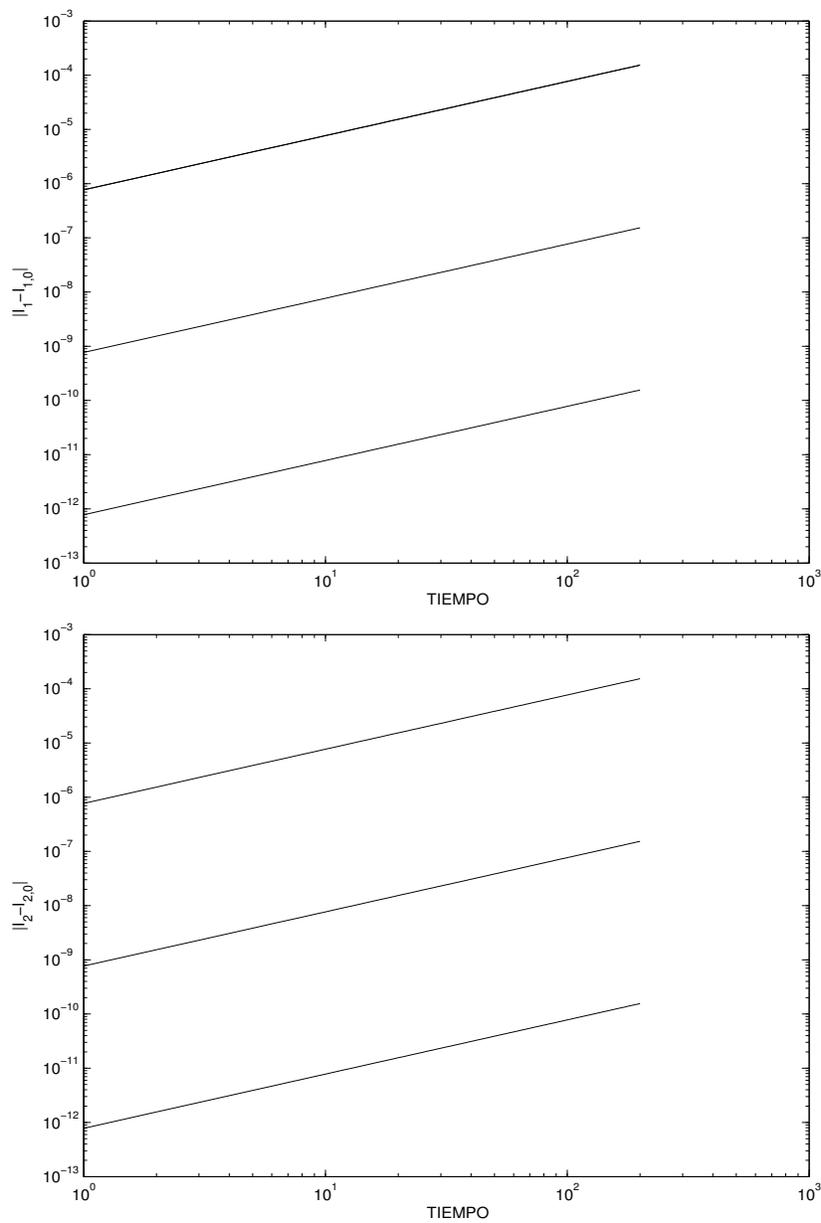


Figura 3.2: Error frente al tiempo para el método no proyectado de Lawson ($d = 1$) cuando se integra una onda plana exacta con $h = 0.1, 0.01, 0.001$: Error en la norma (arriba), Error en el momento (abajo).

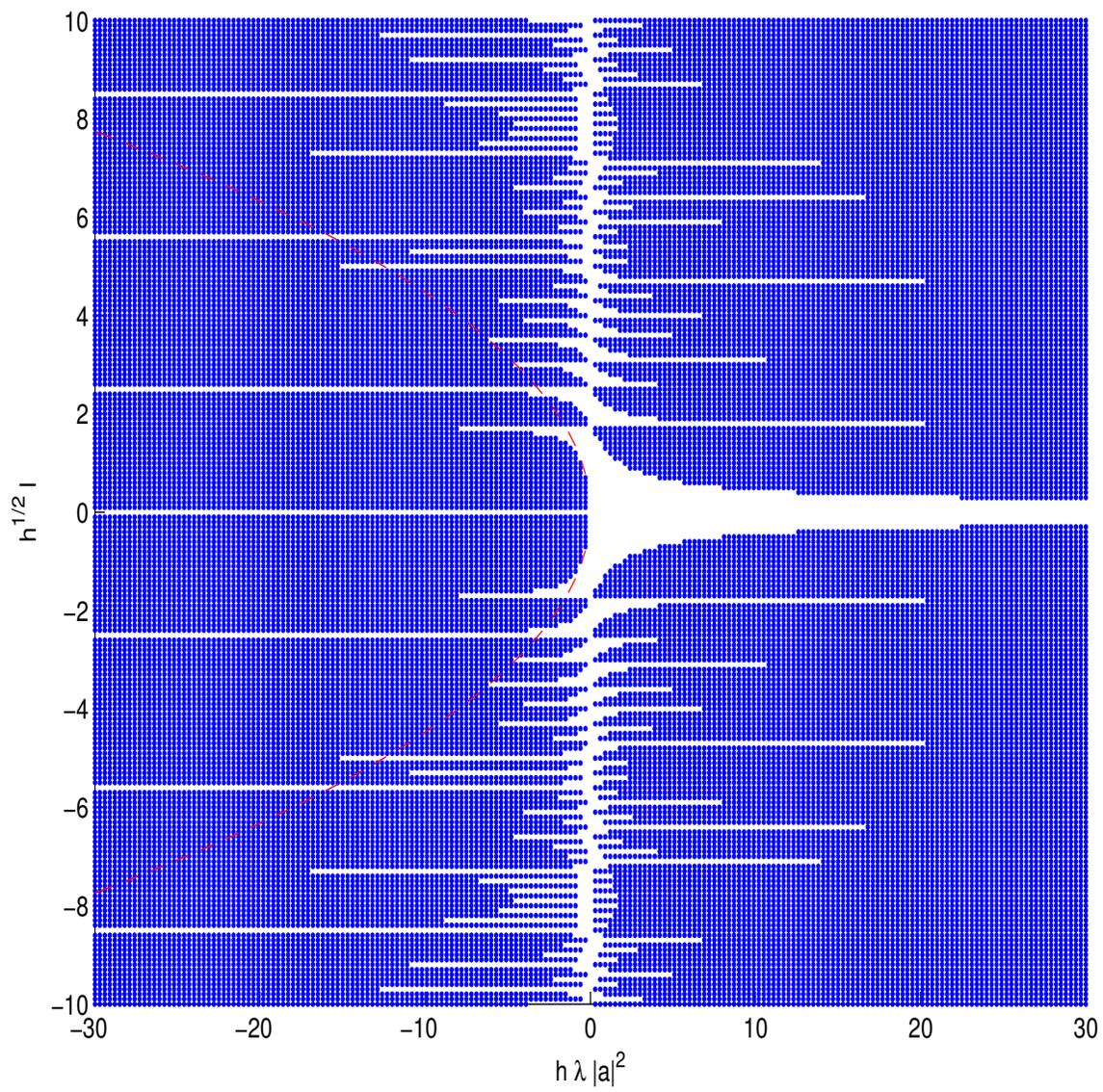


Figura 3.3: Región de estabilidad para el método de Strang (oscuro es inestable)

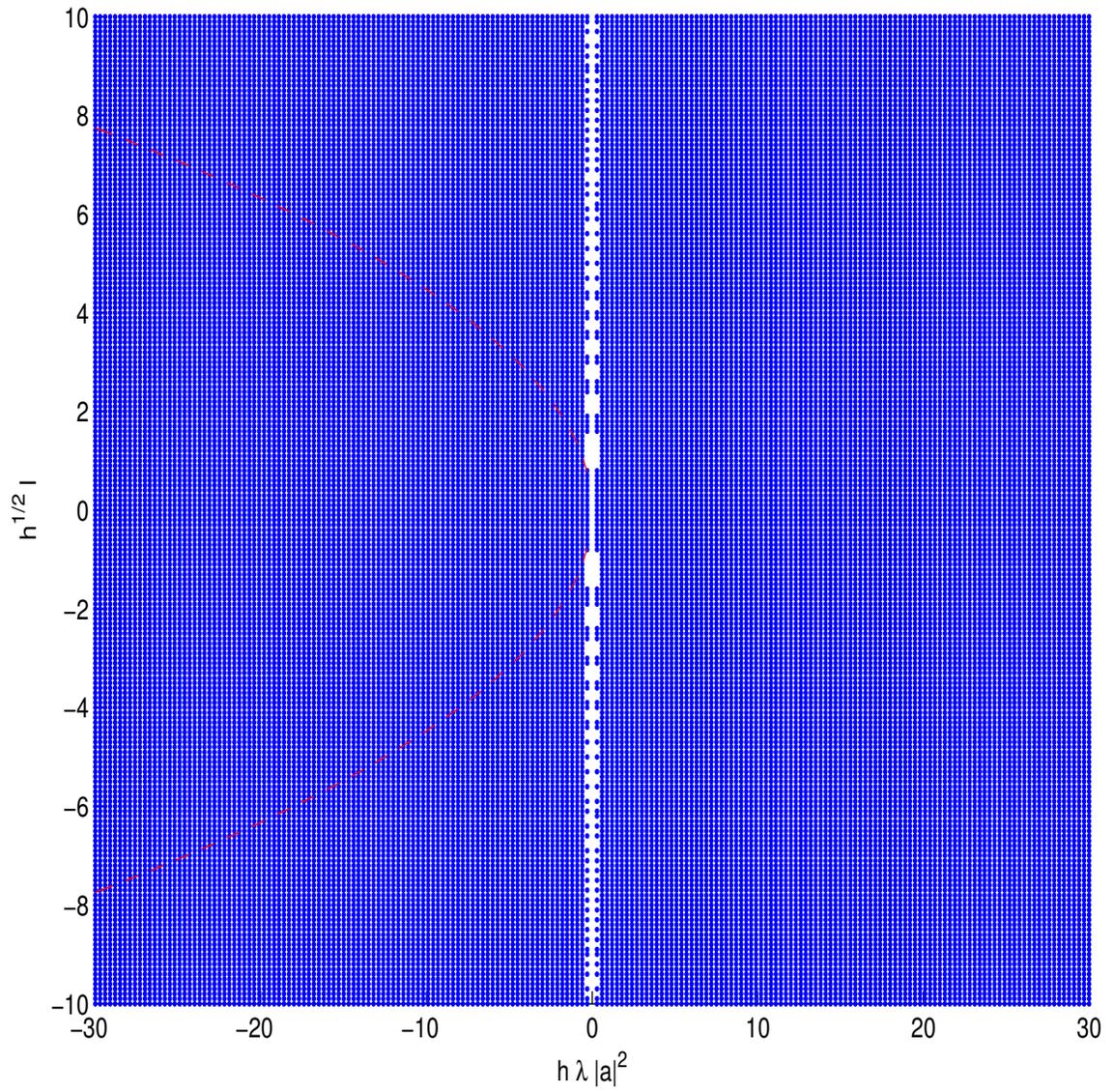


Figura 3.4: Región de estabilidad para el método de Lawson ($d=1$) sin proyectar (oscuro es inestable)

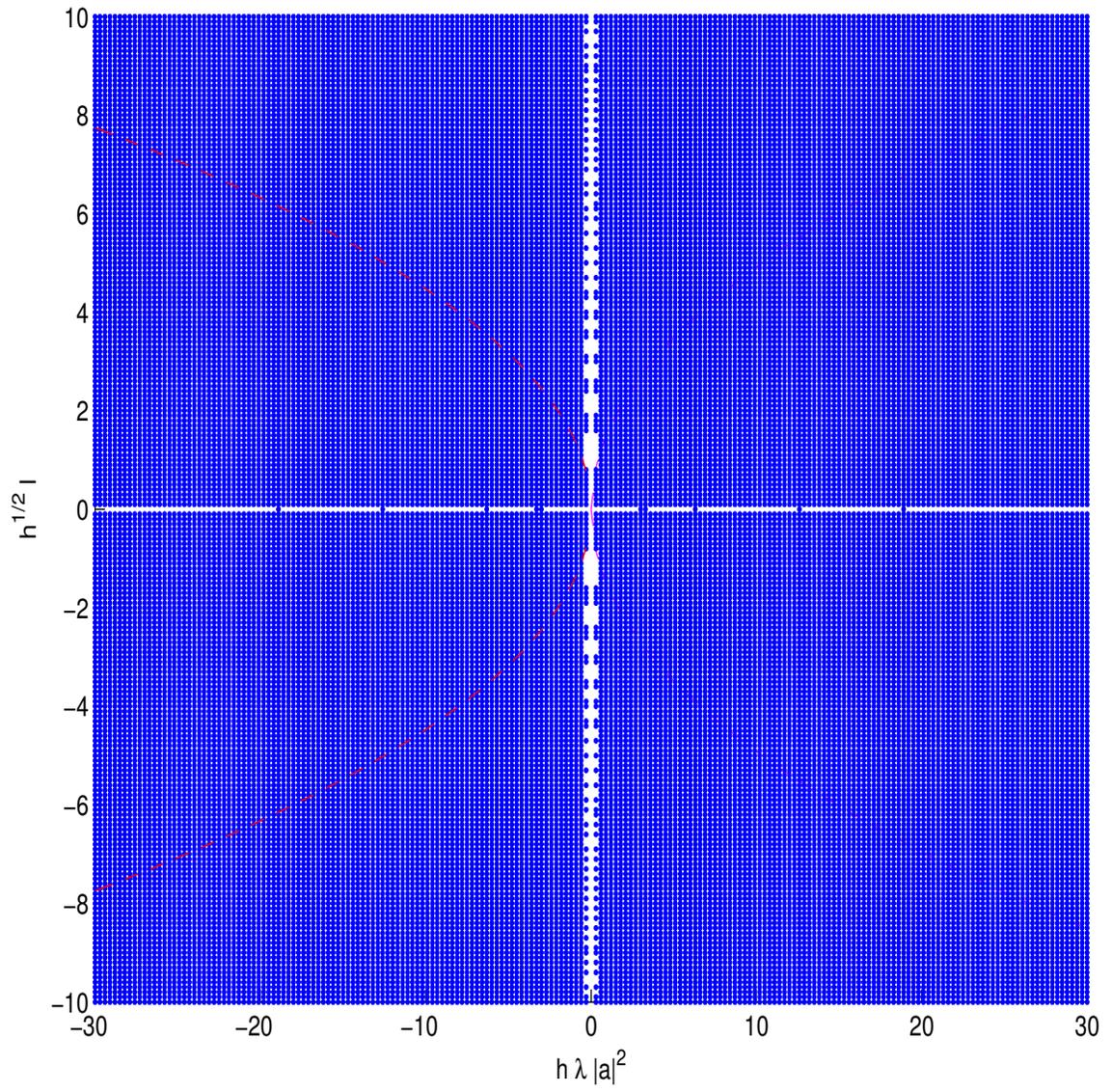


Figura 3.5: Región de estabilidad para el método de Lawson ($d=1$) proyectado (oscuro es inestable)

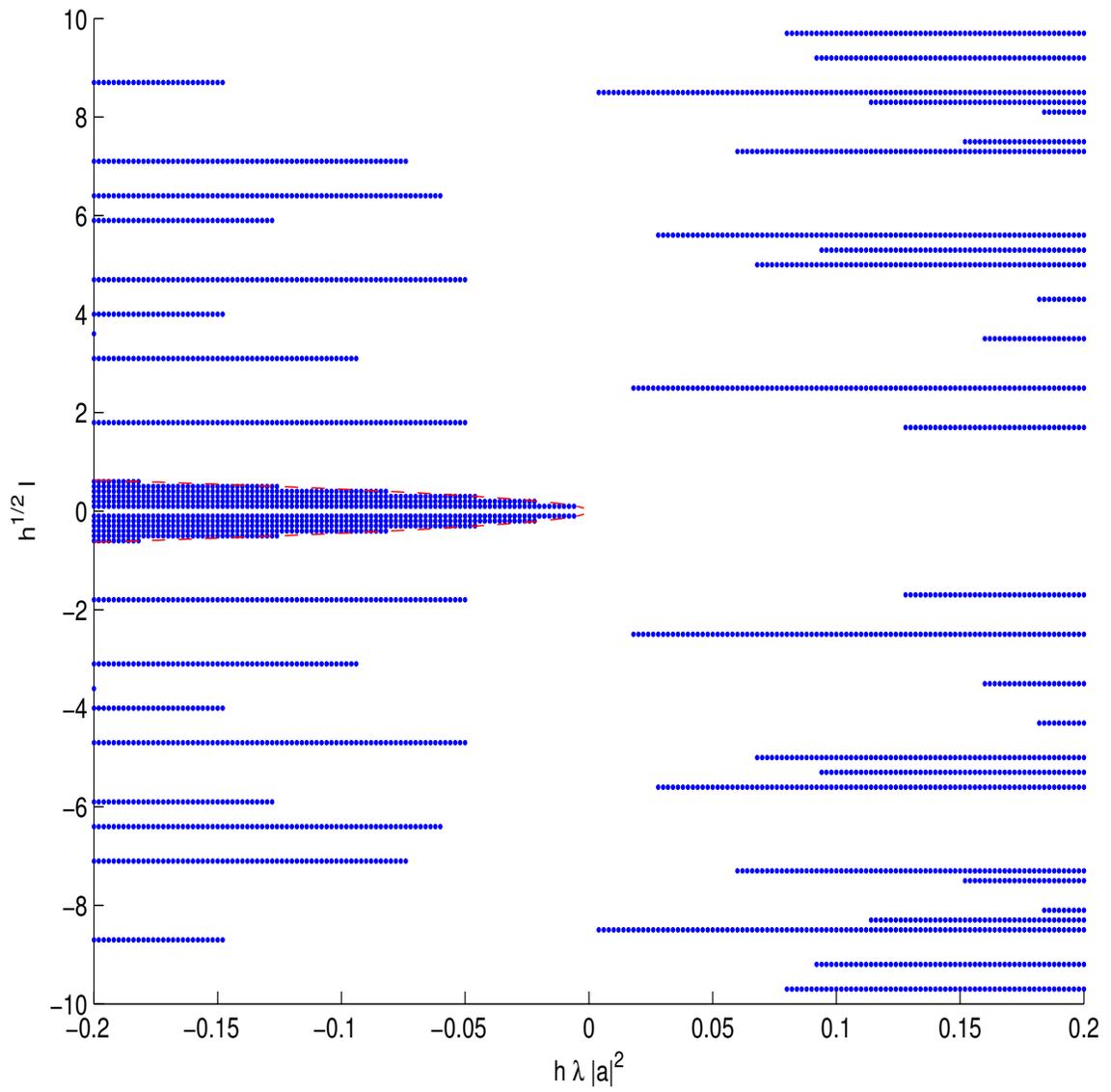


Figura 3.6: Región de estabilidad para el método de Strang (oscuro es inestable)

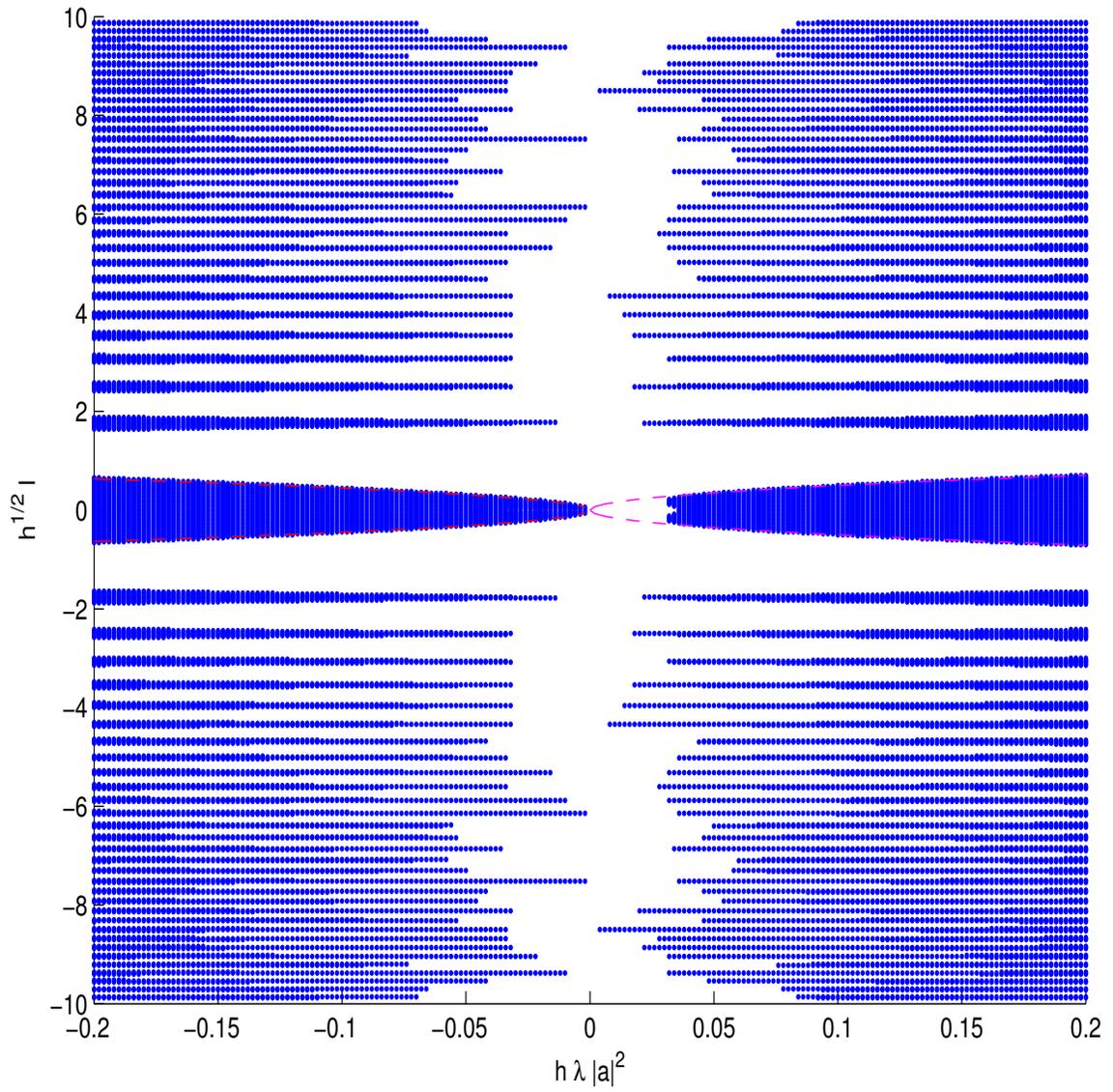


Figura 3.7: Región de estabilidad para el método de Lawson ($d=1$) sin proyectar (oscuro es inestable)

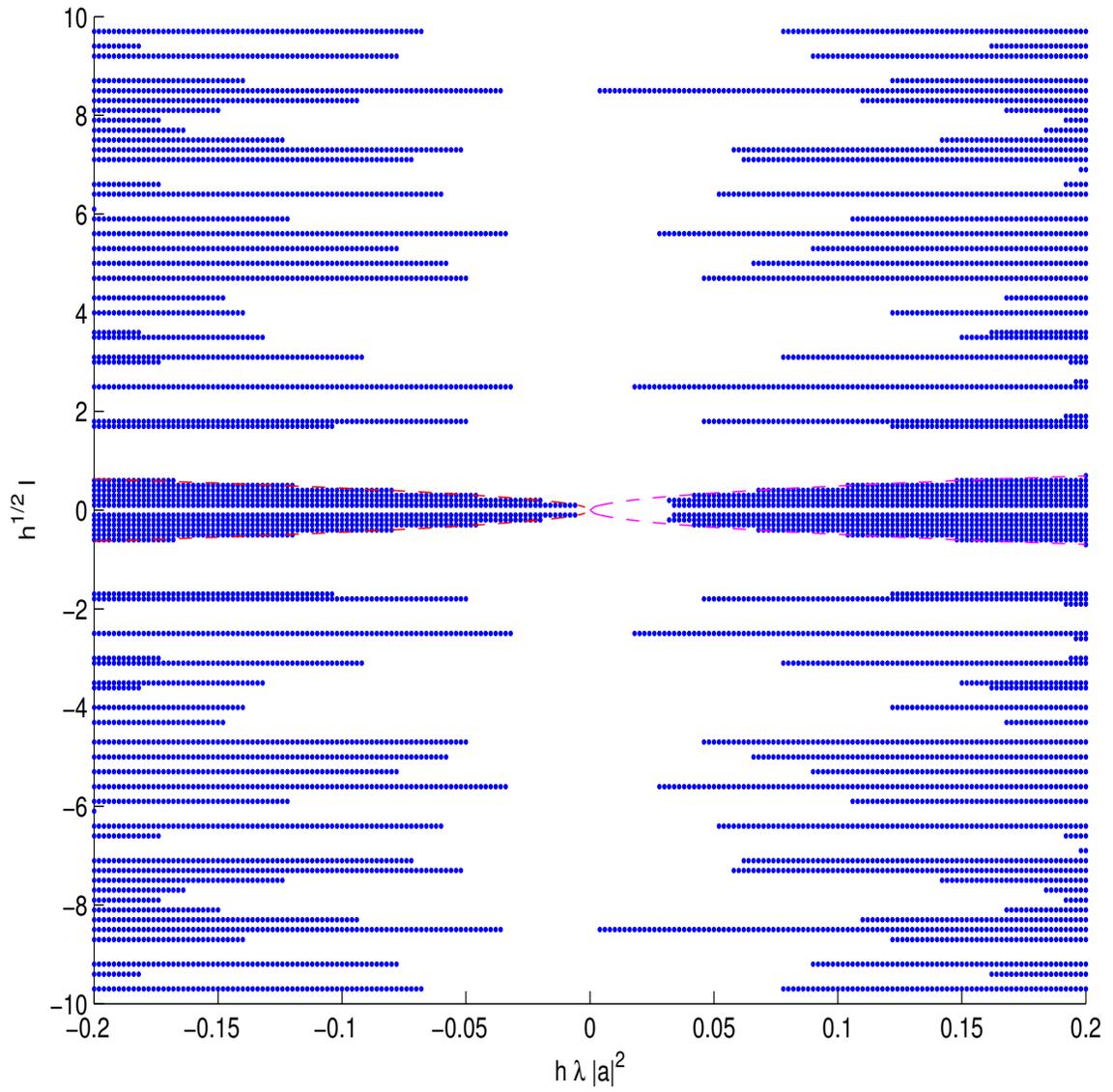


Figura 3.8: Región de estabilidad para el método de Lawson ($d=1$) proyectado (oscuro es inestable)

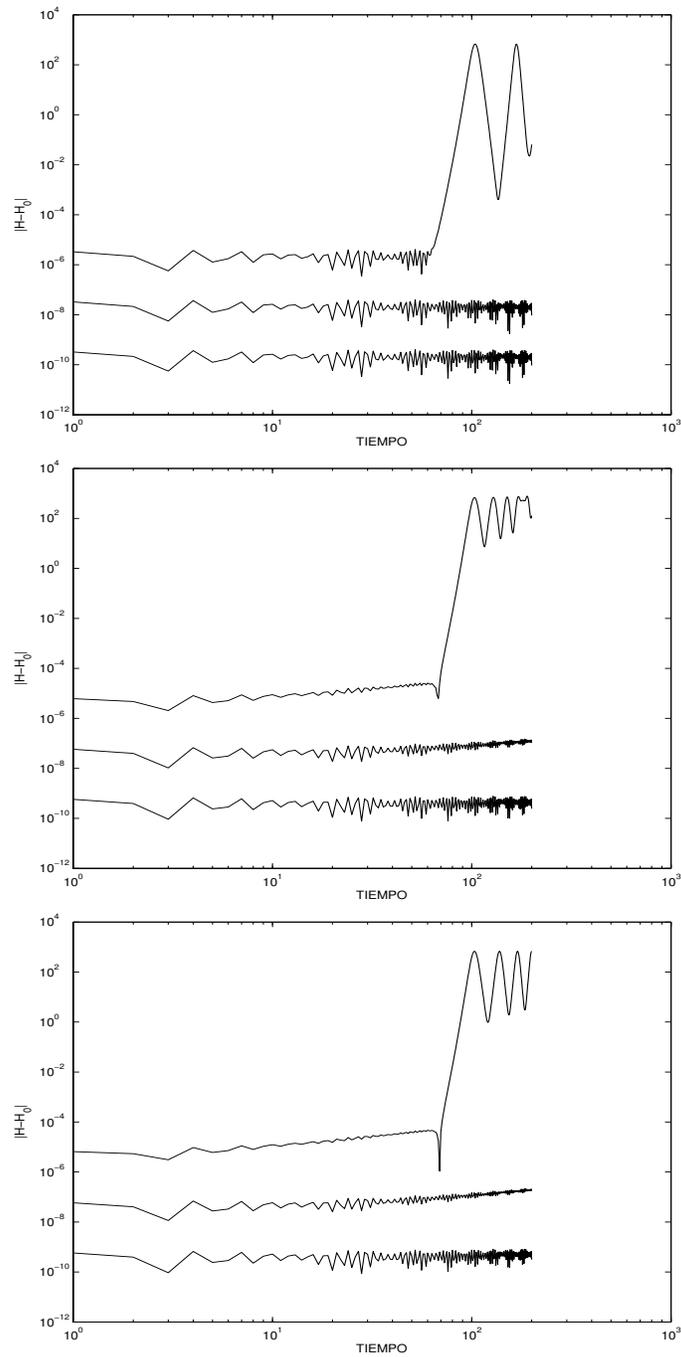


Figura 3.9: Método de Strang (arriba), no proyectado de Lawson ($d=1$) (medio) y proyectado de Lawson (abajo), cuando $a = 1/2$.

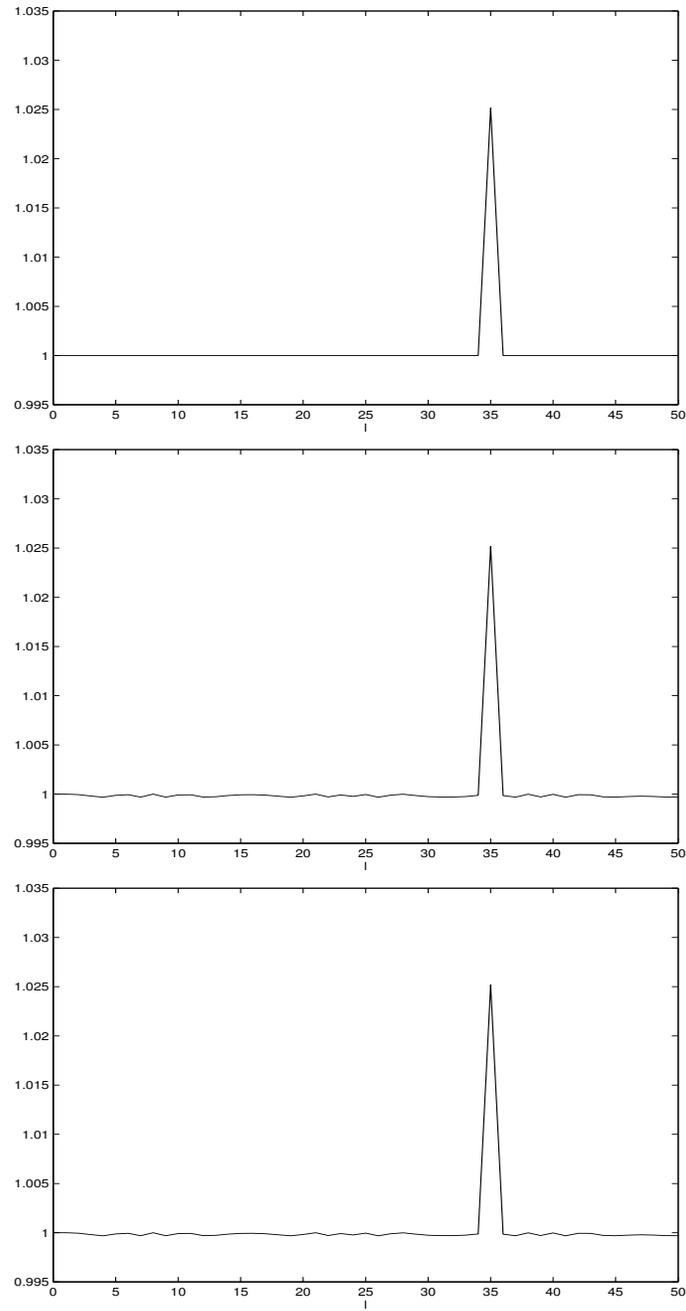


Figura 3.10: Máximo valor absoluto de los valores propios asociados a las matrices de estabilidad: método de Strang (arriba), no proyectado de Lawson ($d=1$) (medio) y proyectado de Lawson (abajo), cuando $a = 1/2$, $h = 0.1$.

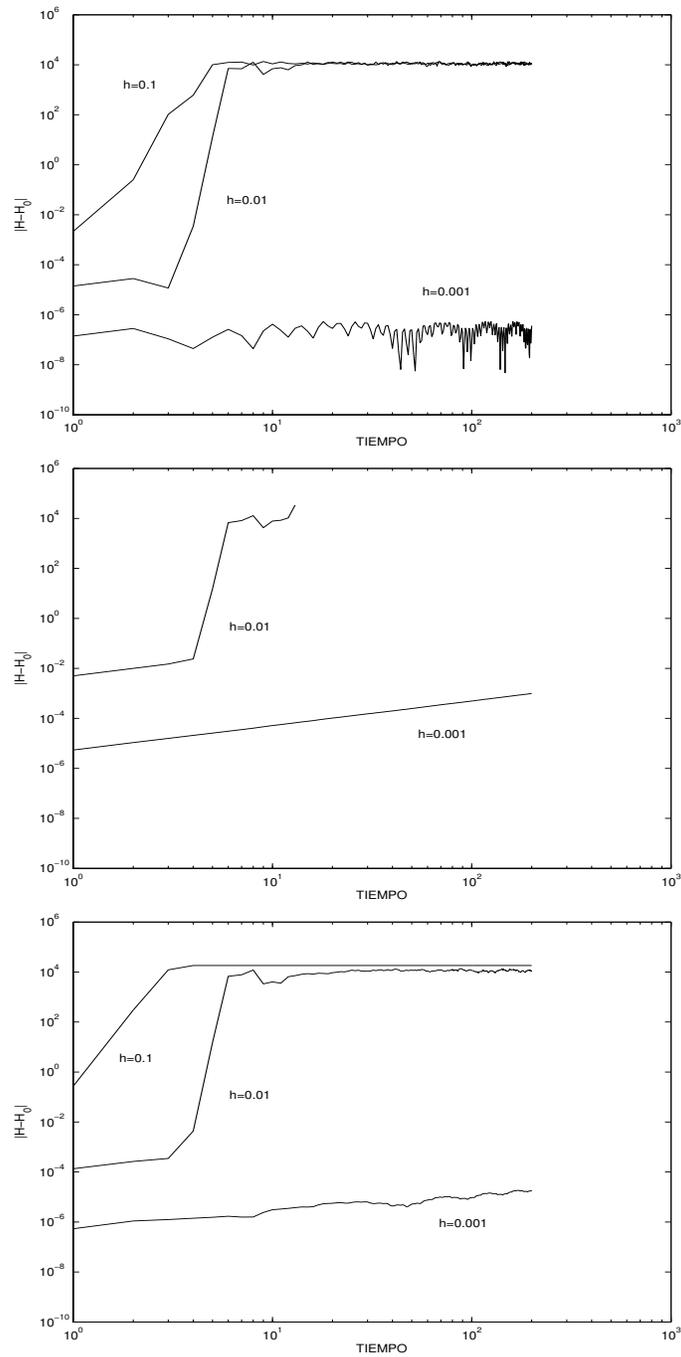


Figura 3.11: Método de Strang (arriba), no proyectado de Lawson ($d=1$) (medio) y proyectado de Lawson (abajo), cuando $a = 2$.

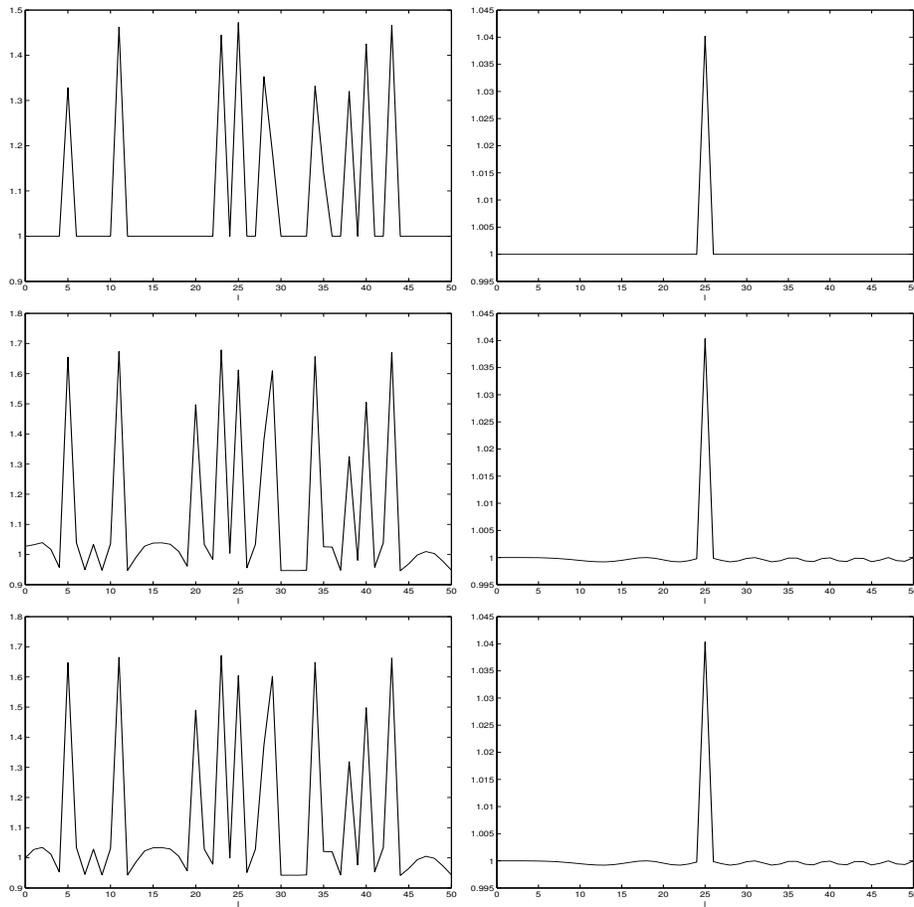


Figura 3.12: Método de Strang (arriba), no proyectado de Lawson ($d=1$) (medio) y proyectado de Lawson (abajo), cuando $a = 2$, $h = 0.1$ (izquierda) $h = 0.01$ (derecha) y $\lambda = 1$.

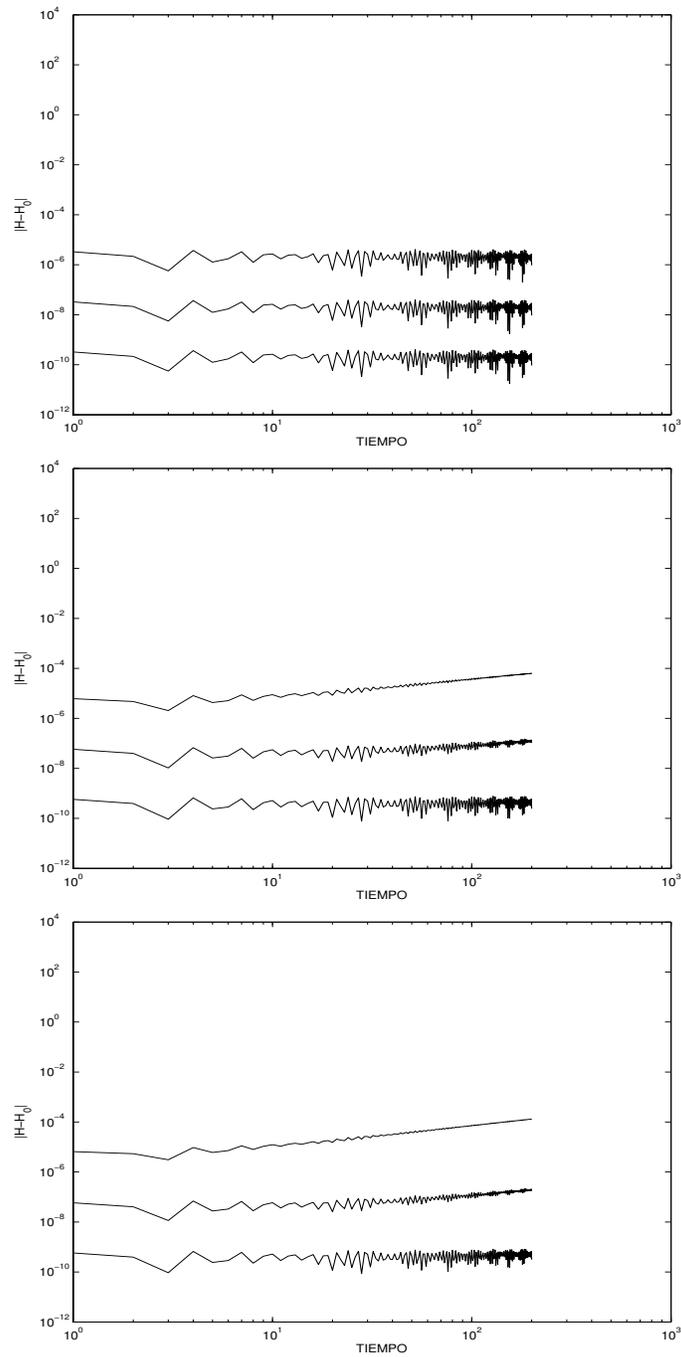


Figura 3.13: Método de Strang filtrado (arriba), no proyectado de Lawson filtrado ($d=1$) (medio) y no proyectado de Lawson ($d=1$) (abajo), cuando $a = 1/2$.

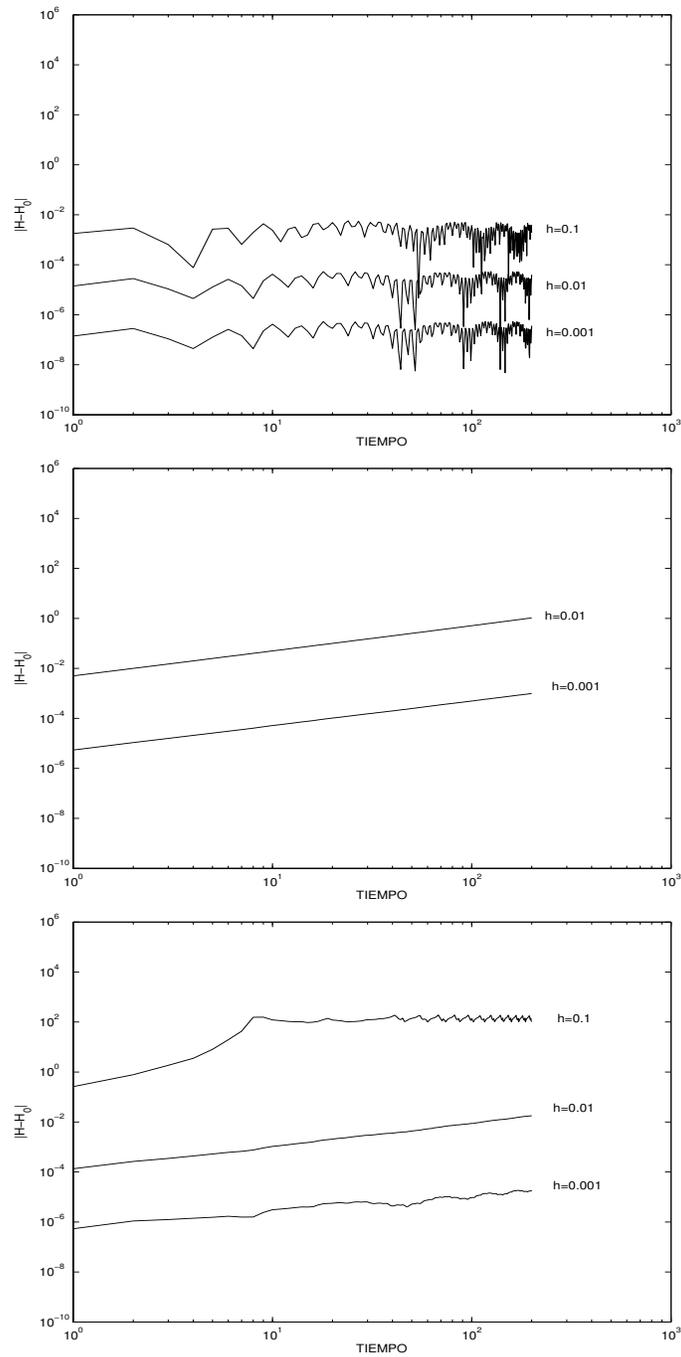


Figura 3.14: Método de Strang filtrado (arriba), no proyectado de Lawson filtrado ($d=1$) (medio) y no proyectado de Lawson ($d=1$) (abajo), cuando $a = 2$.

Bibliografía

- [1] I. Alonso-Mallo & B. Cano, *Spectral/Rosenbrock discretizations without order reduction for linear parabolic problems*, Appl. Numer. Math. **41** (2002) 247-268.
- [2] I. Alonso-Mallo, B. Cano & J. C. Jorge, *Spectral-Fractional Step Runge-Kutta Discretizations for Initial Boundary Value Problems with Time-Dependent Boundary Conditions*, Mathematics of Computation **73** (2004) 1801-1825.
- [3] I. Alonso-Mallo , B. Cano & M. J. Moreta, *Order reduction and how to avoid it when explicit Runge-Kutta-Nystrom methods are used to solve linear partial differential equations*, J. Comput. Appl. Math. **176/2** (2005) 293-318.
- [4] I. Alonso-Mallo , B. Cano & M. J. Moreta, *Optimal time order when implicit Runge-Kutta-Nystrm methods solve linear partial differential equations.*, Appl. Numer. Math. **58** (2008) 539-562.
- [5] I. Alonso-Mallo, A. Durán & N. Reguera, *Simulation of coherent structures in nonlinear Schrödinger equation*, J. Comp. Phys. **229** (2010) 8180–8198.
- [6] H. Berland, A. L. Islas & C. M. Schober, *Conservation of phase space properties using exponential integrators on the cubic Schrödinger equation*, J. Comp. Phys. **225** (2007) 284–299.
- [7] H. Berland, B. Owren & B. Skaflestad, *B-series and order conditions for exponential integrators*, SIAM J. Numer. Anal., 43 No. 4 (2005) 1715–1727.

- [8] H. Berland, B. Owren & B. Skaflestad, *Solving the nonlinear Schrödinger equation using exponential integrators*, Modeling, Identification and Control, 27 No. 4 (2006) 201–217.
- [9] S. Blanes & P. C. Moan, *Practical symplectic partitioned Runge-Kutta and Runge-Kutta-Nyström methods*, J. Comp. Math. **142** (2002) 313-330.
- [10] T. Bodurov, *Derivation of the Nonlinear Schrödinger Equation from First Principles*, Annales de la Fondation Louis de Broglie, Volume 30, no 3-4,(2005), pp. 343-352.
- [11] Th. J. Bridges, *Multi-symplectic structures and wave propagation*, Math. Proc. Camb. Phi. Soc, 121 (1997), pp. 141-190.
- [12] B. Cano, *Conserved quantities of some Hamiltonian wave equations after full discretization*, Numerische Mathematik, 103 (2006), pp. 197-223.
- [13] B. Cano & M. J. Moreta, *Multistep cosine methods for second-order partial differential equations*, IMA J. Numer. Anal. **30** (2010), 431-461.
- [14] B. Cano & M. J. Moreta, *High order symmetric multistep cosine methods*, Appl. Numer. Math. **66** (2013), 30-44.
- [15] B. Cano and J. M. Sanz-Serna, *Error growth in the numerical integration of periodic orbits by multistep methods, with application to reversible systems*, IMA J. Numer. Anal. 18 (1998) 57–75.
- [16] E. Celledoni, D. Cohen & B. Owren, *Symmetric Exponential Integrators with an Application to the Cubic Schrödinger Equation*, Found. Comput. Math., 8 (2008), pp. 303-317.
- [17] D. Cohen, E. Hairer & C. Lubich, *Conservation of energy, momentum and actions in numerical discretizations of non-linear wave equations*, Numer. Math. 110 (2008) 113–143.
- [18] M. Dahlby & B. Owren, *Plane wave stability of some conservative schemes for the cubic Schrödinger equation*, ESAIM, Math. Model. and Numer. Anal. **43**(4) 677-687 (2009).
- [19] A. Durán & J. M. Sanz-Serna, *The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation*, IMA J. Numer. Anal. **20** (2000) 235–261.

- [20] E. Faou, L. Gauckler & C. Lubich, *Plane wave stability of the split-step Fourier method for the nonlinear Schrödinger equation*, published online in Forum of Mathematics, Sigma. DOI: <http://dx.doi.org/10.1017/fms.2014.4>
- [21] L. Gauckler & C. Lubich, *Splitting integrators for nonlinear Schrödinger equations over long times*, Found. Comp. Math. **10** (2010) 275–302.
- [22] W. B. Gragg, *Repeated extrapolation to the limit in the numerical solution of ordinary differential equations*. Thesis, Univ. of California; see also SIAM J. Numer. Anal., 2 (1965) 384–403.
- [23] J. Ginibre & G. Velo, *On a class of nonlinear Schrödinger equation, I. General case*, J. Func. Anal. **32** (1979) 1–32.
- [24] J. Ginibre & G. Velo, *The global Cauchy problem for the nonlinear Schrödinger equation revisited*, Ann. Inst. Henri-Poincaré **2** (1985) 309–327.
- [25] A. González-Pachón, *Estudio de la Idoneidad de los Integradores Exponenciales para para la ecuación de Schrödinger no lineal*, Advised Research Work, University of Valladolid, 2008.
- [26] E. Hairer, *A Runge-Kutta method of order 10*, J. Inst. Maths. Applics **21** (1978) 47–59.
- [27] E. Hairer, C. Lubich & G. Wanner, *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [28] E. Hairer, C. Lubich & G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 31, Springer, Berlin 2002.
- [29] E. Hairer, S. P. Norsett & G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff problems*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1993.
- [30] E. Hairer & G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1996.
- [31] M. Hochbruck & A. Ostermann, *Exponential Runge-Kutta methods for parabolic problems*, Appl. Numer. Math. **53** (2005) 323–339.

- [32] M.Hochbruck & A. Ostermann, *Exponential integrators*, Acta Numerica (2010) 209-286.
- [33] M. Hochbruck & A. Ostermann, *Explicit Exponential Runge-Kutta methods for semilinear parabolic problems*, SIAM J. Numer. Anal., 43, No.3 (2005), pp. 1069-1090.
- [34] W. Hundsdorfer & J. G. Verwer, *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2003.
- [35] T. Kato, *On nonlinear Schrödinger equations*, Ann. Inst. Henri-Poincaré, Physique Théorique 46 (1987) 113–129.
- [36] O. Koch, Ch. Neuhäuser & M. Thalhammer, *Embedded Exponential Operator Splitting Methods for the Time Integration of Nonlinear Evolution Equations*, to appear in Appl. Numer. Math.
- [37] J. D. Lawson, *Generalized Runge-Kutta processes for stable systems with large Lipschitz constants*, SIAM J. Numer. Anal. 4 (1967) 372–380.
- [38] C. Lubich, *On splitting methods for Schrödinger-Poisson and cubic nonlinear Schrödinger equations*, Math. Comp. 77 (2008) 2141–2153.
- [39] J. W. Miles, *An envelope soliton problem*, SIAM J. Appl. Math. 41 (1981) 227–230.
- [40] S. Nørsett, *The Numerical Solution of Stiff Systems*, Thesis, University of Oslo, Norway, 1969
- [41] P. J. Prince & J. R. Dormand, *High order embedded Runge-Kutta formulae*, J. Comp. Appl. Math. 7 (1981) 67–75.
- [42] S. Reich, *Multi-symplectic Runge-Kutta collocation methods for Hamiltonian wave equations*, J. Comput. Phys., 157 (2000), pp. 473-499.
- [43] J. M. Sanz-Serna & M. P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, London, 1994.
- [44] I. N. Sneddon, *Fourier transforms*, Dover Publications, New York, 1995.

- [45] G. Strang, *On the construction and comparison of difference schemes*, SIAM J. Numer. Anal. **5** (1968) 506–517.
- [46] C. Sulem & P. L. Sulem, *The Nonlinear Schrödinger Equation*, Springer-Verlag, New York, 1999
- [47] C. Sulem & P. L. Sulem, *The Nonlinear Schrödinger Equation. Self-Focusing and Wave Collapse*, Springer, New York, 1999.
- [48] J. A. C. Weideman & B. M. Herbst, *Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation*, SIAM J. Numer. Anal. **23** (1986) 485–507.
- [49] H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*, Phys. Lett. A **150** (1990) 262–268.