

# UN MÉTODO DE DESCOMPOSICIÓN TEMPORAL PARA LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKI

FEDERICO AQUIZE LEÓN

Tesis de Licenciatura

Director: Diego Rial

18 de diciembre de 2024



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Departamento de Matemática



# Abstract

En ésta tesis exponemos un método de descomposición temporal de cuarto orden para la Ecuación de Gross-Pitaevski, un caso particular de la Ecuación de Schrödinger. Pretendemos aportar cierta claridad y formalidad a algunas ideas que ya han aparecido en el área para abordar ésta y otras ecuaciones en derivadas parciales. Presentamos también algunas implementaciones usadas para testear éstos métodos.

*Palabras clave:* Schrödinger, Gross-Pitaevski, Splitting, descomposición temporal, ecuaciones en derivadas parciales.



# Agradecimientos

*"Gracias por la razón, que no cesará de soñar con un plano del laberinto..."— Jorge Luis Borges,  
Otro poema de los dones*

A Anita Aguilar y a Ignacio Martín Gómez Florenciano, quienes con capacidad y modestia me ayudaron a que existan este texto y sus programas.

A Diego Rial, quien me dió el gusto de poder hablar bien de mi director de tesis.

A Natalia Martinez, quien me enseñó a darle voz a mi voz. "Gracias por la música, misteriosa forma del tiempo."

Al Team Álvarez, que me enseña a atar con tripa mi corazón y, sin más que eso, salir a la cancha.

A Juan Gutman, por tanto de todo. Por las tardes de estudio en Patapizza (gracias a pizzería Patapizza de Balvanera).

A Juliana Gutman por "un acontecimiento capital de la historia de las naciones occidentales: el descubrimiento del Oriente."

A Manu Ranelli y Bruno Restelli, italianos que hablan en español y me ayudan, cuando la noche es más oscura, a esperar el día en mi corazón.

A Borges por el misterio esencial y por mostrarme unos agradecimientos mejores. ("Gracias por el álgebra, palacio de precisos cristales").

A Carlos Solari, Carlos Gardel y Carlos Jiménez por cuidar mi estado de ánimo. A Ricardo Iorio, el Payador Perseguido, por ser galopiadador contra el viento. A Evaristo Páramos, por resistir ahora y siempre al invasor con una poción mágica que nos hace invencibles: el cerebro.

A Florencia Lang, compañera de vida y, por lo tanto, presente en todos los agradecimientos. "Gracias quiero dar por el amor, que nos deja ver a los otros como los ve la divinidad."

A la Universidad de Buenos Aires, por la educación pública, gratuita y de calidad. Al país que la hizo y hace posible.

Al Gran Pueblo Argentino, salud.



# Índice

<b>I</b>	<b>Introducción</b>	<b>10</b>
<b>II</b>	<b>Preliminares Teóricos</b>	<b>11</b>
1.	Espacios de Sobolev	11
1.1.	Definiciones generales . . . . .	11
1.2.	Desigualdad de Gagliardo-Nirenberg . . . . .	13
2.	Polinomios ortogonales	14
2.1.	Generalidades . . . . .	14
2.2.	Cuadraturas de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre . . . . .	15
3.	Métodos Espectrales	16
<b>III</b>	<b>Especificidades teóricas de éste estudio</b>	<b>18</b>
4.	Ecuación de Schrödinger y Ecuación de Gross-Pitaevskii	18
4.1.	Generalidades . . . . .	18
4.2.	Existencia y unicidad de solución en la Ecuación de Gross-Pitaevskii . . . . .	19
5.	Métodos de Descomposición Temporal	23
6.	Hamiltoniano	25
<b>IV</b>	<b>Desarrollo del Método de Descomposición Temporal</b>	<b>26</b>
6.1.	Planteo inicial . . . . .	26
6.2.	Reducción dimensional . . . . .	28
6.2.1.	Caso 1: condensado en forma de disco ( $\gamma_x = 1; \gamma_y \approx 1; \gamma_z \gg 1$ ) . . . . .	28
6.2.2.	Caso 2: condensado en forma de cigarro ( $\gamma_x \gg 1; \gamma_y \gg 1; \gamma_z = 1$ ) . . . . .	29
6.2.3.	Forma unificada de escritura (3D, 2D y 1D) . . . . .	30
6.3.	Método de Laguerre-Hermite de cuarto orden con splitting temporal 1D . . . . .	30
6.3.1.	Presentación del método . . . . .	30
6.3.2.	Solución del subproblema con el Operador A . . . . .	32
6.4.	Método pseudoespectral de Hermite para la GPE 1D . . . . .	33
6.4.1.	Desarrollo del Método 1D . . . . .	33
6.4.2.	Estabilidad del método de splitting pseudoespectral de Hermite para 1D . . . . .	40
6.4.3.	Convergencia del método de splitting pseudoespectral de Hermite para 1D . . . . .	42
6.5.	Método pseudoespectral de Laguerre para la GPE 2D con simetría radial . . . . .	43

6.6. Método pseudoespectral de Laguerre-Hermite para la GPE 3D con simetría cilíndrica	46
--	----

## **V Implementación** **49**

<b>7. Resultados</b>	<b>49</b>
7.1. Generalidades . . . . .	49
7.1.1. Estado fundamental . . . . .	49
7.1.2. Testeo directo del Método para la GPE . . . . .	58
7.1.3. Testeo a través del Multiplicador de Lagrange . . . . .	61

## **VI Conclusiones** **69**

<b>8. Conclusiones</b>	<b>69</b>
------------------------	-----------





## Parte I

# Introducción

Este es un trabajo sobre matemática y un poco de física, sobre conceptos abstractos y sus aplicaciones, sobre una zona de encuentro. Es un trabajo sobre ecuaciones diferenciales, área de la matemática conocida por haber surgido en el abordaje y resolución de ciertos problemas aplicados, principalmente de la física. Surgió en un momento donde la ciencia occidental daba uno de sus mayores saltos, especialmente en la capacidad de modelización matemática y en la transformación de la realidad, de la mano de algunas las mayores mentes y publicaciones de toda su historia. Con un optimismo no exento de picardía, quisimos ser parte de ese camino.

Abordamos en este trabajo una ecuación diferencial en derivadas parciales que surge en el contexto de la física cuántica, una de las más famosas (y atractivas) áreas de la física. Ésta ecuación es un caso particular de la Ecuación de Schrödinger, uno de los nombres más conocidos de la ciencia moderna, aunque más no sea por un famoso felino.

Como es sabido, las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales son objetos hostiles, difícilmente de solución analítica y raramente de fácil aproximación numérica. La ecuación de nuestro trabajo no es la excepción, de ahí nuestro interés en abordarla con herramientas teóricas no tan usadas (la descomposición temporal) y la expectativa por ver si esa propuesta, relativamente novedosa, efectivamente pasa la prueba numérica.

Ésta publicación comienza, como es usual, con una presentación de los conceptos más generales pertinentes para el abordaje. Vamos avanzando luego en especificidad con teoría propia del área de estudio y, con ese bagaje, hacemos el abordaje completo de la ecuación que nos convoca. Construimos luego propuestas de resolución y, finalmente, presentamos la implementación numérica y sus resultados.

## Parte II

# Preliminares Teóricos

## 1. Espacios de Sobolev

### 1.1. Definiciones generales

En esta sección usaremos  $\Omega$  para referirnos a un subconjunto abierto de  $\mathbb{R}^n$ . En las definiciones siguientes pensaremos en funciones definidas  $f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ .

**Definición 1.1** (Espacio de Banach). un *Espacio de Banach* es un espacio vectorial, dotado de norma y completo.

**Definición 1.2** (Espacio de Hilbert). un *Espacio de Hilbert* es un espacio vectorial dotado de un producto interno y que es completo con la norma inducida por ese producto interno. Notar que, entonces, un Espacio de Hilbert es un Espacio de Banach.

**Definición 1.3** (Espacios  $L^p$ ). Llamamos *Espacio  $L^p(\Omega)$*  al conjunto de funciones que elevadas a la potencia  $p$  integran finito en  $\Omega$  (considerando la integral usual de Lebesgue), es decir

$$L^p(\Omega) = \{f : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} / \int_{\Omega} |f|^p < \infty\}, \text{ donde } 1 \leq p \leq \infty$$

Notar que en este espacio las funciones están definidas salvo un conjunto de medida cero. Para pensarlo como un espacio vectorial, pensaremos al conjunto como un conjunto de clases de equivalencias de funciones que son iguales, salvo por un conjunto de medida cero.

Consideraremos en estos espacios la norma usual dada por

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

para el caso  $p < \infty$ , mientras que para el caso  $p = \infty$  consideramos, como es usual

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} = \inf\{a \in \mathbb{R} / \mu(\{x \in \Omega / |f(x)| \geq a\}) = 0\}$$

Así, éstos espacios resultan ser, además de espacios vectoriales, espacios de Banach. En el caso particular de  $p = 2$ , si pensamos a éste espacio con el producto interno dado por

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} fg,$$

$L^2(\Omega)$  resulta ser además un espacio de Hilbert. Éste es efectivamente el producto interno canónico con el que lo trabajaremos, el usual.

**Definición 1.4** (Espacios  $L_2^p$ ). Llamamos Espacio  $L_2^p(\Omega)$  al conjunto de funciones  $f \in L^p$  tales que  $x^2 f \in L^p$ . Es decir:

$$L_2^p(\Omega) = \{f \in L^p / \int_{\Omega} (x^2 |f|)^p < \infty\}$$

Constituye también un espacio vectorial al que si le asignamos la norma

$$\|u\|_{L_2^p(\Omega)} = \|x^2 u\|_{L^p(\Omega)}$$

resulta también ser un espacio de Banach.

Vale observar que como en principio estamos en  $n$  dimensiones, estamos entendiendo por  $x^2$  al producto interno de un vector de variables por sí mismo.

**Definición 1.5** (Derivada débil). Sea  $u \in L^p(\Omega)$ , decimos que  $v \in L^p(\Omega)$  es su *derivada débil respecto de  $x_i$*  si  $\forall \phi \in C_c^\infty(\Omega)$  vale que:

$$\int_{\Omega} u \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = - \int_{\Omega} v \phi$$

En general, decimos que  $v_\alpha \in L^p(\Omega)$  es la *derivada débil de orden  $\alpha$*  de  $u$  si  $\forall \phi \in C_c^\infty(\Omega)$  vale que:

$$\int_{\Omega} u D^\alpha \phi = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v_\alpha \phi$$

Donde  $\alpha$  es un vector de  $N$  coordenadas enteras no negativas que indica cantidad de derivaciones en cada una de las  $N$  variables espaciales (lo que se llama un *multiíndice*),  $|\alpha|$  es la suma simple de los valores de esas coordenadas y  $D^\alpha$  representa derivar a una función cuanto indica este vector.

**Definición 1.6** (Espacio de Sobolev). Definimos el *Espacio de Sobolev*:

$$W^{k,p}(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega) / \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^n / |\alpha| \leq k, \text{ existe } D^\alpha u \text{ en el sentido débil y } D^\alpha u \in L^p(\Omega)\}$$

Éste espacio es claramente un espacio vectorial (en el sentido en que lo era también  $L^p(\Omega)$ , es decir, salvo conjuntos de medida cero).

Podemos además, en  $W^{1,2}(\Omega)$ , definir el producto interno

$$\langle u, v \rangle_{W^{1,2}(\Omega)} := \langle u, v \rangle_{L^2(\Omega)} + \sum_{i=1}^N \left\langle \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\rangle_{L^2(\Omega)}$$

Con éste producto interno,  $W^{1,2}(\Omega)$  resulta un espacio de Hilbert, al que notaremos  $H^1(\Omega)$ . Análogamente notaremos  $H^k(\Omega)$  al espacio de Hilbert  $W^{k,2}(\Omega)$  y el producto interno será la natural extensión de ésta idea, sumando además los productos internos en  $L^2(\Omega)$  de las derivadas que existan.

Vale mencionar también un resultado conocido de los espacios de Sobolev que usaremos, para  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$

$$U \in W^{2,2}(\Omega) \iff U \in L^2(\Omega) \wedge \Delta U \in L^2(\Omega) \quad (1.1)$$

**Definición 1.7** (Espacios intersección). Para problemas como el que abordaremos, hace falta pedir condiciones de existencia e integrabilidad para las derivadas débiles de una función, pero también

puede hacer falta pedir integrabilidad para la función al multiplicar por polinomios. Surge entonces la necesidad de considerar espacios de la forma:

$$X(\Omega) = H^k(\Omega) \cap L_2^p(\Omega)$$

Resultará natural en estos espacios considerar la norma:

$$\|u\|_{X(\Omega)} = \|u\|_{H^k(\Omega)} + \|u\|_{L_2^p(\Omega)} \quad (1.2)$$

Esto es claramente una norma, heredando la condición de tal de las propiedades de norma de los espacios implicados.

En este trabajo, nos interesará concretamente el espacio para  $k = 2 = p$  es decir

$$X(\Omega) = H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)$$

Vale mencionar, antes de terminar esta sección, otro resultado conocido que nos será práctico y es que en  $H^2(\Omega)$ , la norma  $\|u\|_{H^2(\Omega)}$  es equivalente a usar en su lugar

$$\|u\|_{H^2(\Omega)} = \|\Delta u\|_{L^2(\Omega)}$$

Es decir, que la norma estándar de  $H^2(\Omega)$  tal como la definimos arriba se puede reemplazar por la norma en  $L^2(\Omega)$  del Laplaciano de la función (por supuesto, en el sentido débil). Lo usaremos por practicidad para 'acortar' la norma con la que hagamos cuentas.

## 1.2. Desigualdad de Gagliardo-Nirenberg

Establecidas las definiciones anteriores podemos enunciar una desigualdad fundamental, conocida en el análisis funcional, que usaremos para probar que el problema a abordar cumple ciertas condiciones teóricas muy deseables.

Sea  $1 \leq q \leq \infty$ , sean  $j$  y  $m$  enteros no negativos tales que  $j < m$ . Sea también  $1 \leq r \leq \infty$ ,  $p \geq 1$  (éste número representa el  $p$  de los espacios  $L^p$ ) y  $\theta \in [0, 1]$  el número que haga falta para que la igualdad

$$\frac{1}{p} = \frac{j}{n} + \theta \left( \frac{1}{r} - \frac{m}{n} \right) + \frac{1-\theta}{q}, \quad \text{para } \frac{j}{m} \leq \theta \leq 1 \quad (1.3)$$

sea cierta. Entonces se tiene que  $\forall u \in L^q(\mathbb{R}^n)$  tal que  $D^m u \in L^r(\mathbb{R}^n)$  vale que:

$$\|D^j u\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} \leq C \|D^m u\|_{L^r(\mathbb{R}^n)}^\theta \|u\|_{L^q(\mathbb{R}^n)}^{1-\theta} \quad (1.4)$$

En algunos casos particulares como  $j = 0$ ,  $q = +\infty$  y  $rm < n$  o en el caso de que  $1 < r$  y  $(m - j - \frac{n}{r})$  sea un entero no negativo, hacen falta algunas hipótesis adicionales, pero como no nos sucederán esos específicos casos los omitiremos. Lo importante es que en todos los casos  $C = C(j, m, n, q, r, p)$  y no depende de la función  $u$  que es, por supuesto, lo importante.

Ésta cota será de utilidad más adelante para relacionar entre sí las normas de las diferentes derivadas de una función.

## 2. Polinomios ortogonales

### 2.1. Generalidades

En general, dado un subconjunto en la recta real, un espacio de funciones definidas allí y un cierto producto interno, se puede construir una familia de polinomios que sean todos ortogonales entre sí, lo que tiene variadas utilidades. Nos centraremos en dos familias posibles de polinomios, con definiciones muy similares, que son numerables y ortogonales dos a dos dado un cierto producto interno de funciones (que consistirá en ambos casos en la integral con peso en un cierto intervalo de la recta).

**Definición 2.1** (Polinomios de Hermite). Si consideramos  $\Omega = \mathbb{R}$ , dentro de  $L^2(\Omega)$  está contenida una familia numerable de funciones llamada *Funciones de Hermite*. Éstas, son autofunciones de un operador que mencionaremos más adelante y están definidas como

$$U_j(x) = e^{-x^2/2} H_j(x); \quad j \in \mathbb{N}_0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.1)$$

donde a su vez  $H_j(x)$  son los *Polinomios de Hermite*, polinomios definidos (entre muchas formas posibles) por ser las soluciones a la siguiente ecuación diferencial:

$$H_j''(x) - 2xH_j'(x) + 2jH_j(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad j \in \mathbb{N}_0 \quad (2.2)$$

Así, si consideramos  $\Omega = \mathbb{R}$ ,  $\omega = e^{-x^2}$  y el espacio de funciones  $L^2(\Omega, \omega)$ , es decir el mencionado espacio  $L^2(\Omega)$  munido del producto interno dado por la integral con peso

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \int_{\Omega} \phi_n \phi_m e^{-x^2}$$

entonces los *Polinomios de Hermite* constituyen una base de éste espacio y son ortogonales dos a dos. Más aún, para cada polinomio de la familia tenemos una fórmula cerrada para el cuadrado de la norma inducida por el producto interno. Esto se expresa como:

$$\langle H_l, H_j \rangle = \int_{\Omega} H_l(x) H_j(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^l l! \delta_{lj} \quad l, j \geq 0 \quad (2.3)$$

Usaremos intensamente estas Funciones de Hermite por ser autofunciones de un operador que aparecerá en un subproblema que abordaremos.

**Definición 2.2** (Polinomios de Laguerre). Si consideramos  $\Omega = [0; +\infty)$ ,  $\omega = e^{-x}$  y, tal como hicimos en el caso de Hermite, el espacio de funciones con producto interno  $L^2(\Omega, \omega)$ , dado éste último por

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \int_{\Omega} \phi_n \phi_m e^{-x}$$

entonces los *Polinomios de Laguerre*, dados por ser las soluciones, para  $m \in \mathbb{N}_0$ , de la ecuación diferencial:

$$xL_m''(x) + (1-x)L_m'(x) + mL_m(x) = 0, \quad x \in [0; +\infty) \quad (2.4)$$

resultan ser una familia de funciones ortogonales dos a dos. Incluso, con este producto interno, esta misma familia de polinomios ya está normalizada, es decir tienen norma uno::

$$\int_{\Omega} L_m(x)L_n(x)e^{-x}dx = \delta_{mn} \quad (2.5)$$

Éstas funciones nos interesarán por a su vez ser autofunciones de otro de los operadores que aparecerá en un subproblema.

## 2.2. Cuadraturas de Gauss-Hermite y Gauss-Laguerre

Usaremos las generalidades conocidas del cálculo numérico sobre cuadraturas de Gauss para el caso mencionado de los Polinomios ortogonales de Hermite y los de Laguerre.

Recordemos que las cuadraturas son herramientas que nos permiten integrar numéricamente una función en algún subintervalo de la recta a partir de hacer una suma ponderada de evaluaciones de ella en ese subintervalo. La forma de conseguir los puntos en los que hacer esas evaluaciones es considerar una familia de polinomios y considerar los ceros de cada uno de los elementos de la familia para las susodichas evaluaciones.

Concretamente esto quiere decir, para cada  $n \in \mathbb{N}_0$  considerar el polinomio de la familia (en nuestro caso serán los de Hermite o los de Laguerre, como se ha dicho) de grado  $n + 1$ , y considerar  $\{x_0, \dots, x_n\}$  sus  $n + 1$  raíces distintas (recordemos que por ser ortogonales esos polinomios tienen tantas raíces distintas como su grado y están todas dentro del intervalo donde está definida la integral del producto interno correspondiente). Evaluar una función en esos puntos multiplicados por ciertos coeficientes de ponderación permite aproximar la integral de esa función en el intervalo, siempre que esa integral que queremos aproximar sea con el peso correspondiente a cada familia y producto interno.

Por ejemplo en el caso de Hermite, los usaríamos si quisiéramos calcular aproximadamente la integral con el peso de una función  $f(t)$  de la siguiente forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-t^2} dt \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad \text{donde ponderamos con } A_i = \int_{-\infty}^{+\infty} t^i e^{-t^2} dt$$

A su vez, el caso de Laguerre sería:

$$\int_0^{+\infty} f(t)e^{-t} dt \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad \text{donde ponderamos con } A_i = \int_0^{+\infty} t^i e^{-t} dt$$

Es importante mencionar también que en el caso de que  $f$  sea un polinomio de hasta grado  $n + 1$ , ésta fórmula de cuadratura es exacta por construcción.

Hacemos notar finalmente que si queremos aproximar una integral múltiple podemos usar estos mismos métodos de cuadratura que expusimos para el caso de una integral en una sola variable. Ésto es en virtud del Teorema de Fubini (cuando la suavidad de las funciones lo permite), ya que podemos descomponer la integral de varias variables en la productoria de varias integrales de una sola variable y esas resolverla con cuadraturas, con los métodos recién mencionados.

### 3. Métodos Espectrales

En adelante hablaremos de varios resultados y conceptos que se definen de forma general para muchos Espacios de Banach o Hilbert, pero nos interesarán particularmente aplicados al espacio de funciones  $H^2(\Omega)$  (más aún mayoritariamente los pensaremos en la recta real), salvo aclaración en caso contrario. Son ideas ampliamente conocidas, las enunciamos principalmente con la idea de concordar una notación y las escribimos en su expresión más estándar que es la de Fourier aunque, como mencionaremos, otras son posibles.

**Definición 3.1** (Sistema Ortonormal). Decimos que un conjunto de funciones  $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$  contenidas en un espacio de Hilbert  $H^2(\Omega)$  es un *sistema ortonormal* si  $\forall m, n \in \mathbb{N}$ :

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \delta_{mn}$$

donde  $\delta_{mn}$  es la usual Delta de Kroenecker.

Es muy importante notar que entonces los antes mencionados Polinomios de Lagrange son un Sistema Ortonormal en el espacio donde los definimos y que los Polinomios de Hermite basta con hacer un reescalado de normalización (dividir a cada uno por la raíz cuadrada de lo que da el producto interno consigo mismo) para que también lo sean. Usaremos repetidas veces que ambas familia tienen esta útil propiedad

**Definición 3.2** (Serie de Fourier). Dado un sistema de funciones ortonormal  $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$  contenido en  $H^2(\Omega)$  definimos  $\forall f \in H^2(\Omega)$  la *Serie de Fourier de f* como:

$$\sum_{k=1}^{\infty} c_k \phi_k, \quad \text{donde } c_k = \langle f, \phi_k \rangle$$

Usaremos las propiedades usuales y conocidas de convergencia y completitud para la Serie de Fourier en sistemas ortonormales en espacios de Banach, aplicándolas, como se ha dicho, al Banach  $H^2(\Omega)$ .

**Definición 3.3** (Transformada de Fourier). Dado  $\Omega = \mathbb{R}$  y  $f \in H^2(\Omega)$ , notaremos por  $\mathcal{F}(f)$  o por  $\hat{f}$  a la *Transformada de Fourier* de  $f$ . Es decir:

$$\mathcal{F}[f](y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-iyt} dt = \hat{f}$$

Y notaremos con  $\mathcal{F}^{-1}[g]$  o con  $\check{g}$  a la *antitransformada de Fourier* usual, a saber:

$$\mathcal{F}[g](x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y) e^{iyx} dy = \check{g}$$

**Definición 3.4** (Transformada Discreta). Sea primero una grilla  $0, x_1, \dots, x_N$  de  $N+1$  puntos equidistantes una distancia  $h$ , en el intervalo de la recta real  $[0, 2\pi]$  (por convención supondremos este



intervalo ya que cualquier intervalo finito es equivalente vía una transformación lineal). Dadas unas evaluaciones de una función  $f$  (podemos por ejemplo pensar como hasta ahora  $f \in H^2(\Omega)$ ) en los puntos de la grilla  $v_j = f(x_j)$  se define su *Transformada de Fourier Discreta* como:

$$\hat{v}_k = h \sum_{j=1}^N e^{-ikx_j} v_j \quad (3.1)$$

Y su *Transformada de Fourier Discreta Inversa* como:

$$v_j = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^N e^{ikx_j} \hat{v}_k \quad (3.2)$$

Éstas son de gran importancia para el trabajo numérico que justamente se desarrolla en una grilla discreta. Las exponenciales que se usan cumplen la función de ser lo que podríamos llamar un sistema ortogonal finito en el sentido de que si consideramos el vector  $u_k = [e^{ikx_1}, \dots, e^{ikx_N}]^T$  se tiene:

$$u_k^T u_l = N \delta_{kl}$$

Debemos observar ahora sí que éstas definiciones, las de Transformada de Fourier “continua” (la primera que dimos, con la integral) y la Discreta, fueron dadas con las bases de Fourier usuales, con funciones trigonométricas. Sin embargo, mientras tengamos un Sistema Ortonormal de funciones infinito o finito (el finito debería serlo en el sentido recién mencionado para la Discreta), podemos definir de la misma forma la Transformada “continua” y la Discreta respectivamente para ese otro conjunto de funciones. Haremos justamente eso más adelante considerando una Transformada Discreta con conjuntos Funciones de Polinomios de Hermite escalados y mencionaremos el caso de hacerlo con Laguerre también.

## Parte III

# Especificidades teóricas de éste estudio

Nos adentramos ahora en temas menos generales, más propios de éste trabajo, exponiendo conceptos más específicos del área de estudio, en principio desde la matemática, pero sin dudas con puntos de contacto con la física. Presentaremos, por ejemplo, la ecuación que titula a nuestra publicación.

## 4. Ecuación de Schrödinger y Ecuación de Gross-Pitaevskii

### 4.1. Generalidades

La **Ecuación de Schrödinger** es una ecuación diferencial en derivadas parciales, una de las más famosas de la física y la ciencia en general. Recordemos que en cuántica, uno de los hechos más famosos es la imposibilidad de determinar de forma exacta la posición de una partícula (así como tampoco la velocidad, en virtud del Principio de Incertidumbre de Heisenberg). Por lo tanto, la pretensión principal no es encontrar la posición de la partícula en función del tiempo, como en la Mecánica Clásica, sino encontrar la llamada Función de Onda, que no es otra cosa que una densidad de probabilidad. La notaremos  $\psi(\mathbf{x}, t)$  y por definición integrar esta función en una región del espacio nos dará la probabilidad de encontrar a la partícula en esa región. Notar que entonces, por ser una densidad de probabilidad, tendremos de forma natural la normalización:

$$\int_{\Omega} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad (4.1)$$

que vale para cualquier instante de tiempo.

La Ecuación de Schrödinger es la ecuación diferencial que cumple esta Función de onda y resolverla nos permite encontrarla. Por eso, poder integrar esta ecuación es un problema típico de la cuántica. En una de sus expresiones estándar más sencillas, la ecuación tiene la forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

donde  $m$  es la masa atómica,  $\hbar$  es una constante física (la constante de Planck reducida) y  $V(\mathbf{x}, t)$  es un potencial externo, dependiente del tiempo y la posición, que expresa las interacciones con el entorno en el que las partículas se encuentran (electromagnéticas, nucleares, etc.).

La **Ecuación de Gross-Pitaevskii**, nuestro objeto particular de estudio, es la ecuación que cumple la Función de Onda de un sistema físico cuántico específico llamado Condensado de Bose-Einstein. Es un subcaso de Ecuación de Schrödinger de tipo no lineal, donde la no linealidad está dada por una parte que depende cúbicamente de la Función de Onda. Abordaremos la ecuación en la forma siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) + NU_0 |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.3)$$

donde  $N$  es la cantidad de átomos presentes en el BEC,  $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$  es una constante relacionada con la interacción de los átomos con el instrumento de medición y  $V(\mathbf{x})$  es un potencial que sólo depende de la posición, llamado *trampa de potencial externa*. Éste, representa la interacción de las partículas con algún tipo de “fuerza” externa al sistema que restringe el movimiento posible de éstas a una cierta región del espacio (de ahí el nombre de “trampa”, a que las encierra en un determinado lugar). En nuestro abordaje del problema tomaremos trampas de potencial armónicas, es decir de la forma  $V(\mathbf{x}) = \frac{m}{2}(w_x^2 x^2 + w_y^2 y^2 + w_z^2 z^2)$  donde  $w_x$ ,  $w_y$  y  $w_z$  son las frecuencias de trampa en las respectivas direcciones, en una formulación análoga al Oscilador Armónico clásico. Más aún, al igual que en muchos de los experimentos físicos, las que abordaremos serán trampas de potencial de tipo *cilíndricas*, esto es  $w_x = w_y$  (simetría cilíndrica). Analizaremos más adelante en nuestro problema los casos en forma de “disco”, es decir movimientos cilíndricos muy restringidos en el eje  $z$  y en forma de “cigarro” es decir muy restringidos en el plano  $xy$  pero con más libertad en el eje  $z$ .

## 4.2. Existencia y unicidad de solución en la Ecuación de Gross-Pitaevskii

Siendo una ecuación diferencial en derivadas parciales, una de las primeras cosas que hay que discutir es la existencia y unicidad de solución.

Recurrirnos, para responder a esta pregunta, en primer lugar a la bibliografía clásica del área [1] y luego a otros trabajos relacionados como [2]. Allí se expone que si tenemos una Ecuación de Schrödinger no lineal, expresada como

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = O(\psi(\mathbf{x}, t)) + F(\psi(\mathbf{x}, t)) \quad (4.4)$$

donde  $O : H^1(\Omega) \longrightarrow H^1(\Omega)$  es el operador lineal conocido como “del Oscilador Armónico”

$$O\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2}\Delta\psi(\mathbf{x}, t) + x^2\psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.5)$$

(que, salvo por escalares, es tal como en la ecuación de nuestro caso de estudio), donde  $F(\psi(\mathbf{x}, t))$  es una inhomogeneidad no lineal de tipo Lipschitz en conjuntos acotados y donde tenemos una condición inicial  $\psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) \in H^1(\Omega)$ . Se tiene garantizada existencia y unicidad de solución en ese mismo espacio  $H^1(\Omega)$ . En nuestro caso, por ejemplo, el de la GPE, la inhomogeneidad consiste en la no linealidad cúbica.

Veamos entonces (con una notación simplificada, escribiendo nuestras funciones como  $f$  y  $g$  en pos de la brevedad) que cumplimos los anteriores requisitos de existencia y unicidad, es decir mostremos que esa inhomogeneidad no lineal cúbica, definida como el operador  $Ff = |f|^2 f$  en  $X(\Omega) = H^2(\Omega) \cap L^p_2(\Omega)$  es un operador  $F : X \longrightarrow X$  localmente Lipschitz. Esto equivale a ver que si tenemos  $f, g \in X$  vale

$$\|Ff - Fg\|_X \leq C\|f - g\|_X, \quad C = C(f, g) \quad (4.6)$$

Vemos que:

$$\begin{aligned}
|f|^2 f - |g|^2 g &= f^2 \bar{f} - g^2 \bar{g} \\
&= f^2 \bar{f} - f^2 \bar{g} + f^2 \bar{g} - g^2 \bar{g} \\
&= f^2 (\bar{f} - \bar{g}) + \bar{g} (f^2 - g^2) \\
&= f^2 (\bar{f} - \bar{g}) + \bar{g} (f - g)(f + g)
\end{aligned} \tag{4.7}$$

En este último renglón, nos damos cuenta de que si tuviéramos alguna constante que nos permitiera acotar la norma del producto de dos funciones por el producto de las normas, fácilmente obtendríamos la cota deseada. Más exactamente, si valiera que

$$\|fg\|_X \leq K \|f\|_X \|g\|_X, \quad K = K(f, g) \tag{4.8}$$

podríamos usarlo en la reescritura que acabamos de hacer y obtener, con la desigualdad triangular

$$\begin{aligned}
\||f|^2 f - |g|^2 g\|_X &\leq \|f^2 (\bar{f} - \bar{g})\|_X + \|\bar{g} (f - g)(f + g)\|_X \\
&\leq K^2 \|f\|_X^2 \|(\bar{f} - \bar{g})\|_X + K^2 \|\bar{g}\|_X \|(f - g)(f + g)\|_X \\
&\leq K^2 \|f\|_X^2 \|(f - g)\|_X + K^2 \|\bar{g}\|_X \|(f - g)\|_X (\|f\|_X + \|g\|_X) \\
&\leq K^2 (\|f\|_X^2 + \|f\|_X \|g\|_X + \|g\|_X^2) \|(f - g)\|_X \\
&\leq C(f, g) \|(f - g)\|_X
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Se obtendría entonces la condición de Lipschitz local que queríamos, en virtud de que en el último paso podríamos efectivamente acotar por alguna constante que fuera función de la norma de las funciones  $f$  y  $g$ .

De más está decir, ésto hay que probarlo, que podemos acotar la norma del producto de dos funciones por una constante y el producto de las normas. Ésto lo vamos a probar con la norma para el espacio intersección que propusimos en la definición (1.2), en la expresión compactada, de la norma en  $H^2(\Omega)$  dada por la norma del Laplaciano. Es decir

$$\|f\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} = \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + \|x^2 f\|_{L^2(\Omega)} \tag{4.10}$$

Trabajemos entonces para mostrar que

$$\|fg\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} = \|\Delta(fg)\|_{L^2(\Omega)} + \|x^2 fg\|_{L^2(\Omega)} \tag{4.11}$$

se puede acotar por una constante (que solo depende de los espacios) multiplicando al producto de las normas. Antes un resultado que usaremos.

**Lema.**  $H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega) \subset L^\infty(\Omega)$ .

En efecto, si  $f \in H^2(\Omega)$ , vía transformada de Fourier, tenemos que  $\hat{f}(y)(1 + |y|^2) \in L^2(\widehat{\Omega})$  y por lo tanto  $\hat{f} \in L^1(\widehat{\Omega})$ .

*Demostración.*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |\hat{f}(y)| dy &= \int_{\Omega} |\hat{f}(y)| \frac{(1 + |y|^2)}{(1 + |y|^2)} dy \\ &\leq \left( \int_{\Omega} |\hat{f}(y)|^2 (1 + |y|^2)^2 \right)^{1/2} \left( \int_{\Omega} \frac{1}{(1 + |y|^2)^2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (4.12)$$

La integral de la izquierda converge porque, como se dijo, esa función es integrable al cuadrado y la integral de la derecha converge como convergen en general las funciones de la forma  $\frac{Cte}{1+|y|^\beta}$  cuando  $\beta > n$ . Eso en nuestro caso sucede pues  $n$  será 3, ya que estamos trabajando en el espacio físico tridimensional.

Obtuvimos por lo tanto que  $\hat{f} \in L^1(\tilde{\Omega})$  y entonces, aplicándole el Lema de Riemann-Lebesgue, su antitransformada  $\check{\hat{f}} = f \in C_0(\Omega)$ , es decir, obtenemos que  $f$  debe ser una función continua que tiende a cero en el infinito y por lo tanto  $f \in L^\infty(\Omega)$  que es lo que queríamos probar.  $\square$

**Lema.**

$$\|fg\|_{H^2(\Omega)} \leq K \|f\|_{H^2(\Omega)} \|g\|_{H^2(\Omega)}, \quad K = K(f, g), \quad \text{con } \|u\|_{H^2(\Omega)} = \|\Delta u\|_{L^2(\Omega)} + \|u\|_{L_2^2(\Omega)}$$

*Demostración.* Empezamos con la *cota para el término Laplaciano de la norma*. Sabemos que

$$\Delta(fg) = \Delta f \cdot g + \nabla f \cdot \nabla g + f \cdot \Delta g$$

Veamos el primer y el tercer término, que son análogos. Usando, como se probó, que  $H^2(\Omega) \cap L_2^p(\Omega) \subset L^\infty(\Omega)$  tenemos

$$\|\Delta f \cdot g\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)} \|g\|_{L^\infty(\Omega)}$$

y, por supuesto,

$$\|\Delta g \cdot f\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\Delta g\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{L^\infty(\Omega)}$$

Además, en virtud de la Desigualdad de Gagliardo-Nirenberg mencionada en 1.4

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^{3/4} \|f\|_{L^2(\Omega)}^{1/4} \leq C \left( \frac{\|\Delta f\|_{L^2(\Omega)}}{4/3} + \frac{\|f\|_{L^2(\Omega)}}{4} \right) \leq Cte \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)}$$

Donde en el paso del medio usamos la Desigualdad de Cauchy-Schwarz para números reales. Llegamos entonces a que

$$\|\Delta f \cdot g\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)} \left( Cte \|g\|_{H^k(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \right) \leq \tilde{cte} \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \quad (4.13)$$

Y análogamente

$$\|\Delta g \cdot f\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\Delta g\|_{L^2(\Omega)} \left( Cte \|f\|_{H^k(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \right) \leq \tilde{cte} \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} \quad (4.14)$$

Ya tenemos entonces acotados el primer y el tercer término, solo queda acotar el segundo término, la norma  $L^2(\Omega)$  del producto de los gradientes. Usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz es inmediato obtener que

$$\|\nabla f \cdot \nabla g\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\nabla f\|_{L^4(\Omega)} \|\nabla g\|_{L^4(\Omega)}$$

Usaremos nuevamente la Desigualdad de Gagliardo-Nirenberg, ya que nos interesa, al igual que en lo anterior, poder acotar la norma de los gradientes en términos de la norma  $L^2(\Omega)$  de las funciones o de sus laplacianos ya que ahí la podemos acotar con la norma del espacio. Usando la Desigualdad se obtiene que

$$\|\nabla f\|_{L^4(\Omega)} \leq C \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^{1/2} \|f\|_{L^2(\Omega)}^{1/2} \leq C \frac{1}{2} (\|\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega)})$$

Donde en el último paso usamos la forma más básica de la desigualdad de Cauchy-Schwarz. Obtengamos entonces que

$$\|\nabla f \cdot \nabla g\|_{L^2(\Omega)} \leq \left( cte \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \right) \left( cte \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \right) \quad (4.15)$$

Hemos acotado entonces los tres términos que componen  $\Delta(fg)$ , cada uno en términos de constantes por el producto de las normas. Juntamos los tres entonces obteniendo

$$\|\Delta(fg)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \quad (4.16)$$

*Cota para el término de  $x^2$ :*

El otro término a acotar de los dos que componen la norma del producto de funciones escrita en [4.11](#) es más breve.

$$\begin{aligned} \|(|x|)^2 fg\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} |x|^4 |f|^2 |g|^2 dx \\ &\leq \|g\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \|(|x|)^2 f\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \left( cte \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)}^2 \right) \|(|x|)^2 f\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \hat{cte} \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)}^2 \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)}^2 \end{aligned} \quad (4.17)$$

Conseguimos entonces

$$\|(|x|)^2 fg\|_{L^2(\Omega)} \leq C_2 \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \quad (4.18)$$

Juntando entonces éste resultado con el anterior que habíamos conseguido para el Laplaciano en [4.16](#) obtenemos

$$\|fg\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \leq K \|g\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} \quad (4.19)$$

tal como queríamos. □

Por lo tanto, en la primera cuenta que hicimos, cuando tuvimos la necesidad, vemos que valía acotar la norma del producto de funciones por una constante y el producto de las normas. Obtuvimos entonces que vale la condición de Lipschitz local que habíamos probado para el operador  $F$ , que dependía de ésta posibilidad de cota para el producto. Concluye la demostración de la condición de Lipschitz local para el operador cúbico.

Hemos mostrado entonces que todo el término de inhomogeneidad de la Ecuación de Gross-Pitaevski es un término localmente Lipschitz. Ésta es la única hipótesis no inmediata de ver de las que pide el Teorema de Existencia y Unicidad mencionado en [1] (puesto que siempre trabajaremos con una condición inicial con la regularidad pedida, de hecho típicamente más). Por lo tanto, el Teorema nos garantiza ambas cosas y podemos quedarnos satisfechos de que tiene sentido la búsqueda de soluciones que llevaremos a cabo.

## 5. Métodos de Descomposición Temporal

Habiendo clarificado la existencia y unicidad de solución para nuestra ecuación diferencial, nos explayaremos respecto a con qué métodos buscaremos la solución que, como es usual, no será analítica. Llegamos entonces al sustento teórico más inmediato del trabajo, los llamados métodos de Partición Temporal o Splitting. Estos métodos son propios de problemas de la forma

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = A\psi(\mathbf{x}, t) + B\psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.1)$$

donde A y B son operadores, no necesariamente lineales y no necesariamente conmutativos, definidos en un principio de  $H^1(\Omega)$  en  $H^1(\Omega)$ .

El método apunta a poder solucionar el problema entero a partir de “combinar” las soluciones de  $\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = A\psi(\mathbf{x}, t)$  y de  $\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = B\psi(\mathbf{x}, t)$ . La intención es que estos dos problemas auxiliares surgidos de dividir (split) el problema original, tengan solución numérica más sencilla o, en el mejor de los casos, incluso solución analítica. Apuntaremos a hacer esta división con 4.3, la GPE. Las preguntas que surgen naturalmente son cómo se combinarían estas soluciones (es decir cómo es la construcción de la solución al problema general a partir de estas soluciones a los subproblemas) y, sobre todo, por qué esto aproximaría bien a una solución de la verdadera ecuación.

Lamentablemente la demostración rigurosa de por qué ésta combinación de soluciones de problemas más simples funciona como solución del problema original y de cómo “tienden” a la solución verdadera, no está en ningún lado. Consultamos toda la bibliografía citada en nuestro paper de estudio y, a su vez, todas las referencias de esa bibliografía. En ningún caso hay una demostración que cubra un caso suficientemente general. Exponemos a continuación lo encontrado.

Encontramos en [3] bien detallada la cuenta correspondiente a la demostración de la validez de los métodos de Splitting para el caso en que A y B son **operadores lineales no conmutativos**. Notar que en estos casos, ambos subproblemas al ser lineales tienen una solución analítica sencilla, que expresamos como  $\psi(\mathbf{x}, t) = \exp(\tau A)$  y  $\psi(\mathbf{x}, t) = \exp(\tau B)$  respectivamente. El problema de demostrar la validez de hacer un método de Splitting y de la construcción de la solución general a partir de la de los subproblemas está planteado en la forma:

*Dado un entero positivo  $n$ , llamado ‘orden de integración’ encontrar un conjunto de números reales  $c_1, \dots, c_k$  y  $d_1, \dots, d_k$  tales que:*

$$\exp(\tau(A + B)) = \prod_{i=1}^n \exp(c_i \tau A) \exp(d_i \tau B) + o(\tau^{n+1}) \quad (5.2)$$

Estamos usando la definición usual de exponencial de un operador como serie de potencias, es decir:  $\exp(Ct) = I + tC + \frac{t^2}{2!}C^2 \dots$ . Se trata entonces de desarrollar las series de potencias de ambos lados de la igualdad e imponer que queden los mismos coeficientes en cada monomio, garantizando así la igualdad. Ésto es lo que justifica la combinación de soluciones de los subproblemas para conseguir una solución del problema original. También nos muestra exactamente cómo hacerlo. Por ejemplo, para  $n = 4$  (que usaremos en nuestro abordaje), sería plantear la igualdad entre los productos de series de potencias siguientes:

$$e^{(A+B)t} = e^{d_4 Bt} e^{c_4 At} e^{d_3 Bt} e^{c_3 At} e^{d_2 Bt} e^{c_2 At} e^{d_1 Bt} e^{c_1 At} + o(\tau^5) \quad (5.3)$$

Igualando se obtiene entonces para el caso  $n = 4$ :

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}; \quad c_2 = c_3 = \frac{(1 - 2^{1/3})}{2(2 - 2^{1/3})}; \quad d_1 = d_3 = 2c_1; \quad d_2 = -2^{4/3}c_1; \quad d_4 = 0$$

Es importante notar que teniendo  $d_4 = 0$  el método tiene un paso menos que los que se plantean originalmente en la definición del Splitting para  $n = 4$  dada en (5.3), es decir nos alcanza con 7 pasos para tener la convergencia de orden deseado (cabe mencionar también que, como se ve, hay coeficientes que valen lo mismo. Más adelante, cuando lo necesitemos, resumiremos estos pares de coeficientes repetidos en una sola notación).

Esto ejemplifica concretamente cómo relacionar (en este caso de operadores lineales aunque no necesariamente conmutativos) las soluciones de los problemas auxiliares con la solución del problema que nos interesa: basta aplicar en el orden escrito los operadores en un tiempo  $\Delta t$  escalado por los coeficientes a una dada condición inicial  $\psi(\mathbf{x}, 0)$ .

Lo que estamos haciendo así es evolucionar ese intervalo de tiempo dado con el operador  $e^{c_1 A \Delta t}$  primero y eso nos da una  $\psi(\mathbf{x}, \hat{t}_1)$ . Obtenida esa función, usándola como condición inicial, aplicamos el operador  $e^{d_1 B \Delta t}$  para evolucionar otro intervalo temporal, obteniendo  $\psi(\mathbf{x}, \hat{t}_2)$ . Así consecutivamente. El paso de avance temporal con el operador “solución” entonces estará compuesto de ocho subpasos de evolución (que pueden ser hacia atrás en el tiempo, pues como se ve en este caso, los coeficientes pueden ser negativos) con estos operadores solución de los subproblemas.

La cuenta anterior es muy clara pero, como dijimos, no está cubierta para el caso en que A y B son no lineales y por lo tanto las soluciones no están dadas por exponenciales, por lo que esto en principio no se extiende al caso general. Podría argumentarse la posibilidad de linealizar los operadores no lineales que a uno le aparecieran en un problema y reducir entonces a este caso, pero linealizar operadores arbitrarios puede también traer complicaciones de definición.

Por otro lado, en [4] a primera vista sí encontramos la cuenta que relaciona las soluciones de los subproblemas con la solución del problema completo, cubriendo el caso donde los operadores son no conmutativos cualesquiera (es decir, pueden ser no lineales), pero la encontramos planteada usando composiciones arbitrarias de conmutadores de la forma

$$[A, B] = AB - BA$$

Estos conmutadores consisten en componer en un orden y en el otro los operadores que uno está usando y luego restarlos. El problema es que, suponer que podemos componer una cantidad arbitraria



de veces los conmutadores es suponer, a su vez, que puedo componer una cantidad arbitraria de veces los operadores A y B (que en nuestro caso implican, por ejemplo, tomar Laplaciano de la función) y por lo tanto asumir que la solución es infinitamente diferenciable, aún cuando se trate de diferenciación en el sentido de derivadas débiles. Esto implica, claramente, trabajar con un conjunto sumamente reducido y poco aplicable de funciones.

Concluye así nuestra mención de lo encontrado para justificar y ejemplificar los métodos de Splitting. Son métodos usados para resolver este tipos de ecuaciones en derivadas parciales y de efectividad evidente en la práctica.

## 6. Hamiltoniano

Antes de terminar con ésta sección y abordar concretamente las cuentas del método que motiva éste trabajo, debemos enunciar una magnitud muy utilizada en la física y muy frecuente en el antes mencionado ámbito mixto, de encuentro en el que estamos: el **Hamiltoniano**. En mecánica cuántica se llama así a un operador que representa la “energía” (en un sentido amplio, generalizado) total de un sistema físico. Se define como la suma de los operadores asociados a la energía cinética y potencial. Es decir

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{V}} \quad (6.1)$$

Por ejemplo, para el caso de tener una partícula sola, usando que

$$\hat{\mathbf{T}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (6.2)$$

y que

$$\hat{\mathbf{V}} = V(\mathbf{x}, t) \quad (6.3)$$

vemos que

$$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}, t) \quad (6.4)$$

y vemos, por lo tanto, que la ecuación de Schrödinger, en la expresión simple con que la presentamos, no es más que

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}\psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.5)$$

Vale decir, que las auto funciones y autovalores del operador Hamiltoniano tienen una interpretación física. Éstos resultan ser los únicos valores que puede adoptar la energía del sistema físico.

## Parte IV

# Desarrollo del Método de Descomposición Temporal

Exponemos ahora el desarrollo del Método que motiva nuestro trabajo, exponiendolo en pleno detalle.

### 6.1. Planteo inicial

Ataquemos primero el problema, haciendo como se estila: facilitando el planteo del problema mediante el pulido de la forma de la ecuación. Nos libramos de algunas constantes a través una serie de cambios de variable. Tal como se dijo en la ecuación (4.3) la GPE es:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, t) + NU_0 |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t)$$

Los cambios de variable son:

$$\tilde{t} = w_m t, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a_0}, \quad \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) = a_0^{3/2} \psi(\mathbf{x}, t)$$

donde  $a_0 = \sqrt{\hbar/mw_m}$  y  $w_m = \min\{w_x, w_y, w_z\}$ . Si despejamos las variables y funciones originales en función de las tildadas vamos obteniendo por partes lo que reproducimos a continuación. Al final en toda la ecuación multiplicamo por  $\frac{1}{mw_m^2 a_0^{1/2}}$ . En el momento en que multipliquemos en cada una de las partes de la ecuación lo notaremos con \*:

Empecemos con el término del Laplaciano:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left( \frac{\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{a_0^{3/2}} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{mw_m}{\hbar} \right)^{3/4} \nabla^2 \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}/a_0, \tilde{t}) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{mw_m}{\hbar} \right)^{3/4} \left( \frac{mw_m}{\hbar} \right) \nabla^2 \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right) \stackrel{*}{=} -\frac{a_0^{1/2}}{2a_0^{1/2}} \nabla^2 \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right) \\ &= -\frac{1}{2} \nabla^2 \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right) \end{aligned} \tag{6.6}$$

Luego el término asociado al potencial:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, t) &= V(\tilde{\mathbf{x}}a_0) \left( \frac{\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{a_0^{3/2}} \right) \\ &= \frac{m}{2} (w_x^2 \tilde{x}^2 + w_y^2 \tilde{y}^2 + w_z^2 \tilde{z}^2) \left( \frac{\hbar}{mw_m} \right) \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \left( \frac{mw_m}{\hbar} \right)^{3/4} \\ &= \frac{m}{2} (w_x^2 \tilde{x}^2 + w_y^2 \tilde{y}^2 + w_z^2 \tilde{z}^2) a_0^{1/2} \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \stackrel{*}{=} \frac{1}{2} (\gamma_x^2 \tilde{x}^2 + \gamma_y^2 \tilde{y}^2 + \gamma_z^2 \tilde{z}^2) \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \end{aligned} \tag{6.7}$$

El término de no linealidad cúbica:

$$\begin{aligned}
NU_0|\psi(\mathbf{x}, t)|^2\psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{N4\pi\hbar^2a_s}{m} \left| \frac{\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{a_0^{3/2}} \right|^2 \left( \frac{\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{a_0^{3/2}} \right) \\
&= \frac{N4\pi\hbar^2a_s}{m} \frac{1}{a_0^{9/2}} \left[ \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right)^2 \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right] \\
&= \frac{N4\pi\hbar^2a_s}{m} \frac{m^{9/4}w_m^{9/4}}{\hbar^{9/4}} \left[ \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right)^2 \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right] = \frac{N4\pi a_s m^{5/4} w_m^{9/4}}{\hbar^{1/4} m w_m^2 a_0^{1/2}} \left[ \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right)^2 \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right] \\
&= \frac{4\pi N a_s}{a_0} \left[ \left( \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right)^2 \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right]
\end{aligned} \tag{6.8}$$

El lado izquierdo de la ecuación, que corresponde a la derivada temporal de la función de onda

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{\partial t} \frac{1}{a_0^{3/2}} \\
&= \frac{i\hbar}{a_0^{3/2}} \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, w_m t)}{\partial t} \\
&= \frac{i\hbar m^{3/4} w_m^{7/4}}{\hbar^{3/4}} \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{\partial t} = \frac{i\hbar^{1/4} m^{3/4} w_m^{9/4}}{w_m^2 m a_0^{1/2}} \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{\partial t} \\
&= \frac{i a_0^{1/2}}{a_0^{1/2}} \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{\partial t} \\
&= i \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})}{\partial t}
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Habiendo hecho esto, al juntarlos llegamos efectivamente a una expresión simplificada de constantes físicas de la ecuación (4.3). Por simplicidad quitamos todos los tildados, tomando como nuevas variables y funciones a las que antes eran las tildadas. Queda entonces, uniendo todos los items en que desarmamos la ecuación :

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) + \beta |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \tag{6.10}$$

donde  $\beta = \frac{U_0 N}{a_0^3 \hbar w_m} = \frac{4\pi a_s N}{a_0}$  y donde

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2)$$

con  $\gamma_x = \frac{w_x}{w_m}$ ,  $\gamma_y = \frac{w_y}{w_m}$  y  $\gamma_z = \frac{w_z}{w_m}$ .

## 6.2. Reducción dimensional

Hecha esta operación de pulido de la ecuación para mayor comodidad, se avanza con el planteo conceptual. Nuestro objetivo será naturalmente resolver la GPE en todo el espacio tridimensional. Sin embargo, concentraremos nuestro análisis primero en dos situaciones físicas concretas de interés, que son dos problemas en menos dimensiones, con la intención de luego usarlos para construir la solución al problema tridimensional. Estas dos situaciones físicas claramente diferenciadas están dadas por la relación entre los posibles coeficientes gamma que aparecen en el término del potencial de la GPE en (6.10).

La primera situación es que  $\gamma_x = 1$  (lo tomamos como unidad de referencia),  $\gamma_y \approx 1$  (es decir en el mismo orden de magnitud) y  $\gamma_z \gg 1$ . Este tipo de relación entre los coeficientes es llamado “condensado con forma de disco” porque al ser mucho mayor la frecuencia de la trampa de potencial en  $z$ , tendremos en esa variable un movimiento muy restringido. En cambio, la libertad de movimiento estará mayoritariamente en las dos dimensiones  $xy$ . De ahí el nombre.

La segunda situación que abordaremos se da cuando  $\gamma_x \gg 1$  y  $\gamma_y \gg 1$  pero  $\gamma_z = 1$ . En este caso, al ser grandes las frecuencias de trampa en las variables  $x$  e  $y$ , el movimiento en esas direcciones será muy restringido y se desarrollará mayoritariamente en el eje  $z$ . LLamaremos a esta configuración “condensado en forma de cigarro”. Naturalmente, como las formas geométricas sugieren, el primer caso se puede reducir a un movimiento en dos dimensiones (en adelante 2D) y el segundo caso a un movimiento en una sola dimensión (en adelante 1D).

### 6.2.1. Caso 1: condensado en forma de disco ( $\gamma_x = 1; \gamma_y \approx 1; \gamma_z \gg 1$ )

Este es el caso donde asumimos que el movimiento en el eje  $z$  tiene una trampa de alta energía, es decir que está muy restringido, situación representada por los gammas y su relación cuantitativa antes mencionada. Podemos por lo tanto asumir que la función de onda en el eje  $z$  está descripta por el oscilador armónico del estado fundamental dado por

$$\phi_{ho}(z) = \left(\frac{\gamma_z}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\gamma_z z^2/2} \quad (6.11)$$

Notemos que el escalar que acompaña la exponencial es el que hace falta para que al cuadrado integre 1 a lo largo de todo el eje  $z$ . Esto es, cumple la normalización que mencionamos inicialmente en la condición de (4.1). Vale la pena mencionar también que debemos pedir que esa normalización se cumpla en cada una de las variables, además de imponer que en todo el espacio a la vez integre 1. Podemos imponérselo a cada variable por separado ya que a la Función de Onda, si no integrara 1 en cada variable espacial por separado, podríamos multiplicarla por escalares adecuados de forma que sí lo haga.

De esta forma, siguiendo con la suposición de que el movimiento en  $z$  está dado por el oscilador armónico del estado fundamental, podemos asumir  $\psi = \psi_2(x, y, t)\phi_{ho}(z)$ . Tomando esto, reemplazamos en la ecuación de (6.10).

Notemos que, a la hora de derivar  $\psi$  respecto del tiempo,  $\phi_{ho}(z)$  es una constante y que  $\psi$  se escribe como producto de dos funciones de variables separadas, por lo tanto el laplaciano del producto sigue la regla simple sin términos cruzados. Multiplicando toda la ecuación por el conjugado del oscilador armónico  $\phi_{ho}(z)^*$  (aunque en este caso se trate de una función real, el procedimiento

serviría para casos complejos) aparece en toda la ecuación el módulo al cuadrado del oscilador (salvo en el componente cúbico donde naturalmente queda el módulo a la cuarta) e integrando por último en  $z$  a lo largo de toda la recta en toda la ecuación para sacarnos los componentes asociados al oscilador y la dependencia en  $z$ , obtenemos:

$$i\frac{\partial\psi_2(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi_2(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}(\gamma_x^2x^2 + \gamma_y^2y^2 + \gamma_z)\psi_2(\mathbf{x},t) + \beta_2|\psi_2(\mathbf{x},t)|^2\psi_2(\mathbf{x},t) \quad (6.12)$$

donde  $\beta_2 = \beta\sqrt{\frac{\gamma_z}{2\pi}}$ , escalar que sale de la integral del último término, donde integramos el oscilador armónico elevado a la 4. Advertimos que ahora con  $\mathbf{x}$  estamos notando al vector de dos coordenadas  $(x, y)$  ya que justamente, como dijimos, el movimiento de interés en este caso sucede en esas coordenadas y además matemáticamente, como ya integramos en  $z$ , toda dependencia funcional de esa variable ha sido eliminada

Notemos también que como la ecuación tiene invariancia ante traslaciones temporales, podemos reemplazar  $\psi_2 \rightarrow \psi e^{-i\frac{\gamma_z t}{2}}$ , con la intención de eliminar el término  $\frac{\gamma_z}{2}\psi_2$  en el término que corresponde al potencial. En efecto, este reemplazo afecta de forma directa sólo el término de la izquierda, que tiene una derivada temporal, donde al hacer la regla del producto nos aparecerá  $\frac{\gamma_z}{2}\psi_2 e^{-i\frac{\gamma_z t}{2}}$  que es justamente lo que queremos simplificar. Después, notando que en todos los términos que quedan hay un  $e^{-i\frac{\gamma_z t}{2}}$  y notando que el módulo al cuadrado de esta exponencial compleja es 1, podemos simplificarlo de toda la ecuación. Obtenemos entonces una buena versión simplificada, la ecuación efectiva para la GPE 2D:

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}(\gamma_x^2x^2 + \gamma_y^2y^2)\psi(\mathbf{x},t) + \beta_2|\psi(\mathbf{x},t)|^2\psi(\mathbf{x},t) \quad (6.13)$$

### 6.2.2. Caso 2: condensado en forma de cigarro ( $\gamma_x \gg 1; \gamma_y \gg 1; \gamma_z = 1$ )

En este caso, encontraremos analogías con el caso anterior. Recordemos el planteo inicial de este caso. Aquí pensamos al movimiento fuertemente restringido en el plano  $xy$ , pero con más libertad en el eje  $z$ . Así, tal como hicimos en el caso anterior, proponemos

$$\psi(\mathbf{x},t) = \phi_{ho}(x,y)\psi_2(z,t)$$

Donde  $\phi_{ho}(x,y)$  es el oscilador armónico del estado fundamental (así como antes tuvimos en el eje  $z$ ) en cada una de las dos variables. Aquí también se cumple la normalización en cada una de ellas como se mencionó en 6.11 y los escalares que acompañan son los necesarios para que eso suceda. Es decir:

$$\phi_{ho}(x,y) = \left(\frac{\gamma_x}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{\gamma_y}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\gamma_x x^2}{2} - \frac{\gamma_y y^2}{2}} \quad (6.14)$$

Procedemos de forma análoga al caso anterior, escribiendo  $\psi = \phi_{ho}(x,y)\psi_2$  y reemplazándolo en la ecuación (6.10). Luego, tal como antes, multiplicamos por el conjugado  $\phi_{ho}(x,y)^*$  e integramos en todo el plano  $xy$ , quedándonos entonces una Función de Onda de una sola variable espacial. De las constantes que quedan en el potencial nos libramos aprovechando nuevamente la invariancia ante traslaciones temporales (tal como explicamos en el caso anterior) y obtenemos entonces la ecuación efectiva de la GPE 1D:

$$i\frac{\partial\psi(z,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\psi_{zz}(z,t) + \frac{1}{2}(\gamma_z^2 z^2)\psi(z,t) + \beta_1|\psi(z,t)|^2\psi(z,t) \quad (6.15)$$

donde  $\beta_1 = \beta\sqrt{\gamma_x\gamma_y}/2\pi$ .

### 6.2.3. Forma unificada de escritura (3D, 2D y 1D)

Solamente para sintetizar, notemos que los tres casos, es decir el original 3D de la ecuación (6.10), el caso disco de (6.12) y el caso cigarro de (6.15) se pueden resumir en:

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + V_d(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t) + \beta_d|\psi(\mathbf{x},t)|^2\psi(\mathbf{x},t), \quad (6.16)$$

$$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad \psi(\mathbf{x},0) = \psi_0(\mathbf{x})$$

Donde:

$$\beta_d = \beta \begin{cases} \sqrt{\gamma_x\gamma_y}/2\pi; & d=1 \\ \sqrt{\gamma_z}/2\pi; & d=2 \\ 1; & d=3 \end{cases} \quad (6.17)$$

y donde:

$$V_d(\mathbf{x}) = \begin{cases} \gamma_z^2 z^2/2; & d=1 \\ (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2)/2; & d=2 \\ (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2/2)/2 & d=3; \end{cases} \quad (6.18)$$

Recordamos, simplemente para exponer toda la información junta, que las  $\gamma_x, \gamma_y$  y  $\gamma_z$  son constantes positivas y que nuestra Función de Onda debe cumplir siempre la condición de normalización:

$$||\psi(-,t)||^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x},t)|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} |\psi_0(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1$$

## 6.3. Método de Laguerre-Hermite de cuarto orden con splitting temporal 1D

### 6.3.1. Presentación del método

Luego de haber hecho el trabajo de simplificar la GPE, tanto para el caso 3D como para los casos específicos de menor dimensión que nos interesaban, expondremos a continuación cómo queda el método para cada una de esas dimensiones y cómo resolver los subproblemas heredados del Splitting en cada caso. Iremos abordando en orden de dimensión creciente los casos. Comenzaremos exponiendo la expresión más sencilla, el caso 1D resuelto con lo que se llama *el método pseudoespectral de Hermite*. Luego el caso 2D con simetría radial resuelto con *el método pseudoespectral de Laguerre* y finalmente el caso 3D con simetría cilíndrica combinando ambos, el de 2D y el 1D. Nosotros exponemos en pleno detalle el Método Pseudoespectral de Hermite, en los otros iremos más rápido pues son totalmente análogos en procedimiento matemático e implementación.

Antes que nada, tal cómo se explicó en detalle a la hora de las generalidades en la sección correspondiente (5.1), el splitting lo pensaremos, a partir de la ecuación (6.16) como

$$iu_t = f(u) = Au + Bu$$

con A y B dados por:

$$A\psi = \beta_d |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.19)$$

y por

$$B\psi = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V_d(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.20)$$

De esta forma, la solución se construirá, tal como se explicó, antes que nada consiguiendo las soluciones a esos dos subproblemas. Es decir, las obtendremos resolviendo las distintas ecuaciones diferenciales:

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = A\psi(\mathbf{x}, t) = \beta_d |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.21)$$

y

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = B\psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V_d(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (6.22)$$

Suponiendo obtenidas estas soluciones, y en virtud de lo mencionado en la exposición del método general de Splitting en 5.2, usando los coeficientes que hacen falta cuando el método que se busca es de cuarto orden (los que figuran en 5.3) nuestro método construye los siguientes 7 pasos para combinar los subproblemas en nuestra solución del problema general

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= e^{-i2w_1 A \Delta t} u^n; \\ u^{(2)} &= e^{-i2w_2 B \Delta t} u^{(1)}; \\ u^{(3)} &= e^{-i2w_3 A \Delta t} u^{(2)}; \\ u^{(4)} &= e^{-i2w_4 B \Delta t} u^{(3)}; \\ u^{(5)} &= e^{-i2w_3 A \Delta t} u^{(4)}; \\ u^{(6)} &= e^{-i2w_2 B \Delta t} u^{(5)}; \\ u^{n+1} &= e^{-i2w_1 A \Delta t} u^{(6)}; \end{aligned} \quad (6.23)$$

Aquí, como se anticipó en su momento, en virtud de que los 7 coeficientes usados tienen valores repetidos estamos juntando en  $w_1, w_2, w_3$  y  $w_4$  a los pares que tienen el mismo valor, pero, por supuesto, seguimos respetando a rajatabla el orden en que se aplican. Todo esto sucede en un intervalo de tiempo  $[0, T]$  al que discretizamos con una grilla dada por un  $\Delta t > 0$ , y por  $t_n = n\Delta t$  con  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Entonces, suponiendo conocido  $u^n$  que es la aproximación de  $u(t_n)$  (la solución verdadera, que desconocemos, evaluada en el tiempo  $t_n$ ), los pasos del método nos permiten obtener nuestra aproximación numérica para  $u^{n+1}$  que, por todo lo antedicho, es de cuarto orden. Las siguientes subsecciones, entonces, expondrán cómo resolver ambos subproblemas antes de combinarlos.

Surge aquí una pregunta teórica, que también podría haberse pensado cuando expusimos qué es un método de descomposición temporal en la sección de Splitting (5.1): ¿Acaso no es necesario que los operadores que pretendemos aplicar sucesivamente caigan uno dentro del dominio del otro? De no suceder ésto con los operadores que proponemos, no podemos hacer splitting en esta ecuación.

Debemos ver entonces que eso no sucede, que los operadores mandan al espacio  $X = H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)$  en sí mismo, y que entonces esa composición sucesiva es correcta. Para mostrar que son el mismo espacio, en tanto están definidos como el mismo conjunto de funciones, basta con mostrar que la norma del espacio intersección, mencionada en la definición de (4.10) dada por:

$$\|f\|_{H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)} = \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + \|x^2 f\|_{L^2(\Omega)}$$

es equivalente a

$$\|f\| := \|O(f)\|_{L^2(\Omega)} = \|-\Delta f + x^2 f\|_{L^2(\Omega)}$$

es decir, la norma inducida por el Operador B, el que llamamos “del Oscilador Armónico”. De tener esto, estaríamos hablando efectivamente de que una parte del espacio  $X$ , aplica uno de los operadores y cae en un espacio que está planteado con otra norma pero que es equivalente por lo que es el mismo. Y en ese caso, podemos sin problemas aplicar sucesivamente los operadores.

El lector ansioso por resolver éste pendiente deberá esperar hasta que hayamos desarrollado ambos operadores y algunas funciones relacionadas con ellos para poder hacer ésta demostración comodamente. Procedamos entonces con la presentación de los operadores.

### 6.3.2. Solución del subproblema con el Operador A

Afortunadamente esta ecuación se puede resolver de forma exacta. Así que eso haremos y usaremos esa solución exacta en todas las formas del problema (3D, 2D y 1D), sólo irá variando cómo resolvemos la otra ecuación.

Veamos entonces cómo sería esa solución exacta. Si multiplicamos la ecuación (6.21) por  $\psi(\mathbf{x}, t)^*$  (el conjugado de la función de onda) encontramos:

$$i\psi(\mathbf{x}, t)^* \psi_t(\mathbf{x}, t) = \beta_d |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)^* = \beta_d |\psi(\mathbf{x}, t)|^4$$

Si además notamos que la derivada temporal del módulo cuadrado de una función cumple

$$(|U|^2)_t = U^* U_t + U_t^* U = 2\text{Re}(U^* U_t)$$

entonces nuestra ecuación multiplicada por el conjugado muestra que, si pasamos el  $i$  del lado izquierdo al lado derecho, queda

$$\psi^* \psi_t = -i\beta_d |\psi(\mathbf{x}, t)|^4$$

Pero entonces, si ambas cosas son iguales, sus partes reales son iguales. Como el de la derecha es un número imaginario puro (porque son números positivos multiplicados por menos la unidad imaginaria), entonces debe ser

$$2\text{Re}(\psi^* \psi_t) = 0 = (|\psi|^2)_t$$

Obtuvimos entonces que el módulo al cuadrado de la  $\psi$  en este subproblema es una constante respecto del tiempo. Es decir  $|\psi|^2 = |\psi_0|^2$  y entonces la ecuación se reduce simplemente a

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \beta_d |\psi_0(\mathbf{x})|^2 \psi(\mathbf{x}, t) \tag{6.24}$$



Esto es una EDO trivial, donde la derivada temporal de la función buscada es un múltiplo por constantes de la función buscada. Por lo tanto la solución es

$$\psi_A(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t_s) e^{-i\beta_d |\psi(\mathbf{x}, t_s)|^2 (t - t_s)}, \quad t \geq t_s \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$$

Hemos obtenido la solución a 6.21 y, como se mencionó en todas las dimensiones la solución será la misma, así que pasamos a analizar el otro subproblema.

## 6.4. Método pseudoespectral de Hermite para la GPE 1D

### 6.4.1. Desarrollo del Método 1D

En este caso, en virtud de lo analizado en la ecuación 1D de (6.15) la ecuación (6.22) queda reducida a su forma unidimensional:

$$i \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = B\psi(z, t) = -\frac{1}{2} \psi_{zz}(z, t) + \frac{1}{2} (\gamma_z^2 z^2) \psi(z, t) \quad (6.25)$$

Antes que ninguna cosa, observemos que, visto como un operador  $B : X \rightarrow X$  con  $X(\Omega) = H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)$ , es un operador muy conocido (el que ya mencionamos como “del Oscilador Armónico”), que es autoadjunto y, por lo tanto, admitirá una base de autofunciones con autovalores reales. Ésto se puede comprobar en los casos en 2D y 3D donde también sucede.

En este caso  $\Omega = \mathbb{R}$ , es decir la ecuación está planteada en toda la recta real. Más aún, si ahora no pensamos en el lado derecho como un operador sino en la ecuación en sí misma, la que nos aparece es una leve modificación de una también conocida ecuación (que se obtiene en otro contexto, el de buscar qué funciones de  $L^2(\Omega)$  son autofunciones del operador “aplicar dos veces Transformada de Fourier”), cuya solución son Polinomios de Hermite mutiplicados por una gaussiana, es decir las Funciones de Hermite.

Más exactamente, el resultado conocido es que, si  $H_j(x)$  es el  $j$ -ésimo Polinomio de Hermite (de los que ya hemos definido en (2.2), entonces

$$U_j(x) = e^{-x^2/2} H_j(x)$$

cumple la ecuación diferencial

$$-\frac{1}{2} U_j''(x) + \frac{1}{2} x^2 U_j(x) = \lambda U_j(x)$$

Veamos primero que efectivamente esto sucede. Es fácil ver que

$$U_j''(x) = e^{-x^2/2} \left[ H_j''(x) - 2x H_j'(x) + (x^2 - 1) H_j(x) \right]$$

resulta entonces

$$-\frac{1}{2} U_j''(x) + \frac{1}{2} x^2 U_j(x) = e^{-x^2/2} \left[ -\frac{1}{2} \left( H_j''(x) - 2x H_j'(x) + (x^2 - 1) H_j(x) \right) + \frac{1}{2} x^2 H_j(x) \right]$$

Usando la equivalencia para  $H_j''(x)$  dada por (2.2) obtenemos:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}U_j''(x) + \frac{1}{2}x^2U_j(x) &= e^{-x^2/2} \left[ -\frac{1}{2} \left( 2xH_j'(x) - 2jH_j(x) - 2xH_j'(x) + (x^2 - 1) + \frac{1}{2}x^2H_j(x) \right) \right] \\
&= e^{-x^2/2} \left( jH_j(x) - \frac{1}{2}x^2H_j(x) + \frac{1}{2}H_j(x) + \frac{1}{2}x^2H_j(x) \right) \\
&= e^{-x^2/2} \left( j + \frac{1}{2} \right) H_j(x) \\
&= \left( j + \frac{1}{2} \right) U_j(x)
\end{aligned} \tag{6.26}$$

Hemos mostrado entonces que las Funciones de Hermite son autofunciones de un operador casi igual al que tenemos en la ecuación (6.25) (salvo por algunos escalares). Mostramos esto porque, como se estila en este tipo de abordajes, trataremos de escribir la solución a nuestro problema en términos de una base de autofunciones del operador (abordaje que de entrada es natural al ver que se tiene un operador autoadjunto) y esa base será muy parecida a la de las Funciones de Hermite, solo cambiaremos lo que hace falta para cumplir con los escalares. En este caso, esa base es la BON dada por las que llamaremos *Funciones de Hermite escaladas*, dadas por:

$$h_l(z) = e^{-\gamma_z z^2/2} H_l(\sqrt{\gamma_z} z) / \sqrt{2^l l!} (\pi/\gamma_z)^{1/4} \tag{6.27}$$

Veamos primero que estas funciones cumplen ser autofunciones de exactamente el operador que tenemos, el expresado en (6.25). Por simplicidad para hacer la cuenta llamemos  $k = \sqrt{2^l l!} (\pi/\gamma_z)^{1/4}$ . Después de todo estas constantes tienen más que ver con que después las Funciones cumplan una normalización y no con el cumplimiento de la ecuación diferencial, que está claro sucederá si multiplicamos por un escalar. Así, quedan:

$$h_l(z) = e^{-\gamma_z z^2/2} H_l(\sqrt{\gamma_z} z) / k$$

y

$$h_l''(z) = e^{-\gamma_z z^2/2} / k \left( (\gamma_z^2 z^2 - \gamma_z) H_l(\sqrt{\gamma_z} z) - 2\gamma_z z \sqrt{\gamma_z} H_l'(\sqrt{\gamma_z} z) + \gamma_z H_l''(\sqrt{\gamma_z} z) \right)$$

y usando la ecuación que cumple  $H''(x)$  tal como está en 2.2 reducimos a

$$h_l''(z) = e^{-\gamma_z z^2/2} / k \left( (\gamma_z^2 z^2 - \gamma_z - 2\gamma_z l) H_l(\sqrt{\gamma_z} z) \right)$$

Entonces en efecto se cumple la ecuación de autovalores pues

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}h_l''(z) + \frac{\gamma_z^2 z^2}{2} h_l(z) &= e^{-\gamma_z z^2/2} / k \left[ -\frac{1}{2} (\gamma_z^2 z^2 - \gamma_z - 2\gamma_z l) H_l(\sqrt{\gamma_z} z) + \frac{\gamma_z^2 z^2}{2} h_l(z) \right] \\
&= e^{-\gamma_z z^2/2} / k \left[ H_l(\sqrt{\gamma_z} z) \gamma_z \left( \frac{2l+1}{2} \right) \right] \\
&= \left( \frac{2l+1}{2} \right) \gamma_z h_l(z)
\end{aligned} \tag{6.28}$$

Por comodidad, notaremos  $(\frac{2l+1}{2})\gamma_z = \mu_l^z$  y entonces la ecuación de autovalores nos queda:

$$-\frac{1}{2}h_l''(z) + \frac{\gamma_z^2 z^2}{2}h_l(z) = \mu_l^z h_l(z) \quad (6.29)$$

Hemos mostrado entonces que son autofunciones del operador  $B$  para este caso de GPE 1D. Veamos también que son una BON para un producto interno dado por la integral sin peso. Más exactamente:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} h_l(z)h_n(z)dz &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^l l!}(\pi/\gamma_z)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}(\pi/\gamma_z)^{1/4}} H_l(\gamma_z z)H_n(\gamma_z z)e^{-\gamma_z z^2/2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^l l! \pi 2^n n!}} \sqrt{\gamma_z} H_l(\sqrt{\gamma_z} z)H_n(\sqrt{\gamma_z} z)e^{-\gamma_z z^2} dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2^l l! \pi 2^n n!}} H_l(t)H_n(t)e^{-t^2} dt \\ &= \delta_{ln} \end{aligned} \quad (6.30)$$

Donde la última igualdad es inmediata a la luz del producto interno con el que presentamos a los Polinomios de Hermite en (2.3). Recapitulando, tenemos que estas Funciones Escaladas de Hermite son una BON de  $L^2(\Omega)$  y son autofunciones del operador  $B$ .

Dada esta BON y un  $N$  fijo, llamemos  $X_N = \langle h_0, h_1, \dots, h_N \rangle$  al subespacio generado por esas funciones. Entonces, presentamos el *Método Espectral de Hermite 1D* que consiste en encontrar

$$\psi_N(z, t) = \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_l(t) h_l(z) \quad (6.31)$$

de forma tal que  $\psi_N(z, t)$  cumpla la ecuación del operador  $B$  en 1D que venimos trabajando.

Es decir, fijado un  $N$ , pretendemos encontrar  $\hat{\psi}_l(t)$  para construir una función que pertenezca a ese subespacio, que cumpla la ecuación (6.25), pero que también sea lo más “parecida” posible a la función que pretendamos representar (sabemos que de por sí, por el hecho de ser una base finita, no podemos representar sin error nada que no sean polinomios). Pretenderíamos entonces proyectar ortogonalmente la función de interés sobre el subespacio para maximizar el parecido. Pero el producto interno que implicaría hacer de verdad esa proyección es claramente una cuenta que no podemos hacer en la práctica, así que lo que haremos no es exactamente eso, sino que las  $\hat{\psi}_l(t)$  son una aproximación de los coeficientes de proyección ortogonal sobre  $X_N$ . Se trata entonces de una aproximación con dos complejidades, la finitud de la base en un espacio de dimensión infinita y la aproximación del producto interno.

Lo que hacemos es definir como dijimos a la  $\psi_N(z, t)$  y primero le imponemos a esta propuesta que cumpla esta ecuación mencionada. Al hacerlo y usando la linealidad de la suma finita junto con

la ecuación de autovalor (6.29) obtenemos, igualando a cero,:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \psi_N(z, t)}{\partial t} &= i \sum_{l=0}^N h_l(z) \frac{d \hat{\psi}_l(t)}{dt} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_l(t) \frac{d^2 h_l(z)}{(dt)^2} + \frac{\gamma_z^2 z^2}{2} \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_l(t) h_l(z) \\
&= \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_l(t) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2 h_l(z)}{(dt)^2} + \frac{\gamma_z^2 z^2}{2} h_l(z) \right) \\
&= \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_l(t) \mu_l^z h_l(z)
\end{aligned} \tag{6.32}$$

Usando que las Funciones de Hermite Escaladas, como ya dijimos, son BON, si restamos los lados derechos del primer y último renglón obtenemos

$$i \frac{\partial \hat{\psi}_l(t)}{\partial t} = \mu_l^z \hat{\psi}_l(t), \quad l = 0, 1, \dots, N \tag{6.33}$$

de donde sale

$$\hat{\psi}_l(t) = e^{-i\mu_l^z(t-t_s)} \hat{\psi}_l(t_s), \quad t \geq t_s \tag{6.34}$$

y por lo tanto

$$\psi_N(z, t) = e^{-iB(t-t_s)} \psi_N(z, t_s) = \sum_{l=0}^N e^{-i\mu_l^z(t-t_s)} \hat{\psi}_l(t_s) h_l(z) \tag{6.35}$$

En este punto, notemos que obtuvimos la expresión general para la solución numérica de este subproblema, y que afortunadamente solo requiere que sepamos  $\hat{\psi}_l(t_s)$ , es decir la proyección del dato inicial (o sea la función de interés en el tiempo inicial), sobre el espacio  $X_N = \langle h_0, h_1, \dots, h_N \rangle$ . Como ya dijimos, eso requeriría hacer el producto interno

$$\hat{\psi}_l(t_s) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_N(z, t_s) h_l(z) dz$$

y claramente no haremos estas integrales. Entonces, acá sí aproximamos esas proyecciones con la Transformada Discreta de Hermite que nos permitirá obtener cada coeficiente (es importante notar que esto sería una Transformada Discreta en el sentido que desarrollamos en (3.1)).

Más precisamente, dada una función  $U$  su coeficiente de proyección sobre el  $l$ -ésimo elemento de la base es:

$$\hat{U}_l = \sum_{k=0}^N \omega_k^z U(z_k) h_l(z_k), \quad l = 0, 1, \dots, N \tag{6.36}$$

Donde  $z_k$  y  $\omega_k^z$  son los puntos y los pesos escalados de Gauss-Hermite, dados por

$$\omega_k^z = \frac{\hat{\omega}_k^z e^{\hat{z}_k^2}}{\sqrt{\gamma_z}}, \quad z_k = \frac{\hat{z}_k}{\sqrt{\gamma_z}}$$

donde a su vez  $\{\hat{z}_k\}_{k=0}^N$  son los usuales puntos de cuadratura de Gauss-Hermite (es decir, las  $N + 1$  raíces de  $H_{N+1}(z)$ ) y donde  $\{\hat{\omega}_k\}_{k=0}^N$  son los pesos usuales de la cuadratura de Gauss-Hermite. Por lo que éstos cumplen

$$\sum_{k=0}^N \hat{\omega}_k^z \frac{H_l(\hat{z}_k)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^l l!}} \frac{H_n(\hat{z}_k)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} = \delta_{ln}, \quad l, n = 0, 1, \dots, N$$

Notar que con estas definiciones efectivamente pasa que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N \omega_k^z h_l(z_k) h_m(z_k) &= \sum_{k=0}^N \hat{\omega}_k^z e^{\hat{z}_k^2 / \sqrt{\gamma_z}} h_l(\hat{z}_k / \sqrt{\gamma_z}) h_m(\hat{z}_k / \sqrt{\gamma_z}) \\ &= \hat{\omega}_k^z \frac{H_l(\hat{z}_k)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^l l!}} \frac{H_n(\hat{z}_k)}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \\ &= d_{ln}, \quad 0 \leq l, n \leq N \end{aligned} \tag{6.37}$$

y por lo tanto se ve que los  $\omega_k^z$  y los  $z_k$  tal como los estamos considerando, sirven para hacer una transformada discreta de Hermite, pues efectivamente resuelven de manera exacta los productos internos entre los elementos de la base y, por construcción de las cuadraturas, aproximan como se espera la integral de una función contra las Funciones Escaladas de Hermite.

Ahora que tenemos construida la propuesta de solución para la ecuación (6.25) mediante funciones pertenecientes al subespacio generado por las Funciones de Hermite escaladas y aproximaciones numéricas para las proyecciones sobre esas funciones generadoras, podemos escribir el método de descomposición temporal completo, es decir los pasos alternados del splitting especificando lo planteado en (6.23). Teniendo ambas, el método queda:

$$\begin{aligned} \psi_k^{(1)} &= e^{-i2w_1 \Delta t \beta_1 |\psi_k^n|^2} \psi_k^n \\ \psi_k^{(2)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(1)})_l} h_l(z_k) \\ \psi_k^{(3)} &= e^{-i2w_3 \Delta t \beta_1 |\psi_k^{(2)}|^2} \psi_k^{(2)} \\ \psi_k^{(4)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})_l} h_l(z_k), \quad k = 0, 1, \dots, N \\ \psi_k^{(5)} &= e^{-i2w_3 \Delta t \beta_1 |\psi_k^{(4)}|^2} \psi_k^{(4)} \\ \psi_k^{(6)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(5)})_l} h_l(z_k) \\ \psi_k^{n+1} &= e^{-i2w_1 \Delta t \beta_1 |\psi_k^{(6)}|^2} \psi_k^{(6)} \end{aligned} \tag{6.38}$$

Donde  $w_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  son los ya dados en (6.23). A su vez  $\psi_k^n$  es la aproximación de  $\psi(z_k, t_n)$ ,  $\psi^n$  el vector solución entero (que tiene coordenadas)  $\psi_k^n$  y  $\widehat{(\psi^{(-)})_l}$  el  $l$ -ésimo coeficiente de la Transformada

discreta de Hermite de la función del paso anterior del splitting  $\psi^{(-)}$ .

Habiendo presentado los operadores y explicitado el método de descomposición temporal, respondemos ahora la pregunta de si los operadores pueden aplicarse sucesivamente. Veamos entonces que ambos espacios son el mismo viendo que las normas de los espacios son equivalentes.

Una de las dos desigualdades para probar ésta equivalencia es inmediata. Usando la desigualdad triangular tenemos:

$$\|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + \|x^2 f\|_{L^2(\Omega)} \leq \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} + \|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} = 2\|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)}$$

Ésto ya nos dió una de las cotas que queríamos para la equivalencia. La otra desigualdad requiere algunos pasos más. Queríamos ver que

$$\|f\|_{H^2(\Omega) \cap L^2_2(\Omega)} = \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + \|x^2 f\|_{L^2(\Omega)} \leq cte \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}$$

y para eso necesitamos algunos resultados auxiliares.

Notemos primero que

$$\langle -\Delta f + x^2 f; f \rangle = \langle \nabla f; \nabla f \rangle + \langle x f; x f \rangle = \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|x f\|_{L^2(\Omega)}^2$$

donde el producto escalar es el usual del espacio, la integral del producto, y por eso se usó integración por partes. Más aún, se usó que el término de borde es igual a cero. Se pueden dar varios argumentos para la validez del uso de partes y que el término de borde se anula, el más directo es que ésto vale para las funciones del Espacio de Schwarz, que están contenidas dentro de nuestro espacio y que, como éstas son densas, se extiende la propiedad a todas las funciones del espacio.

En segundo lugar, por la Desigualdad de Schwarz, sabemos que

$$\|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{L^2(\Omega)} \geq |\langle -\Delta f + x^2 f; f \rangle|$$

Por lo que, juntando ambas cosas obtenemos

$$\|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{L^2(\Omega)}$$

y

$$\|x f\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{L^2(\Omega)}$$

Si ahora pudiéramos acotar  $\|f\|_{L^2(\Omega)}$  en función de la norma del Operador, tendríamos que la norma del gradiente y del término  $x f$  estarían completamente dominadas por la norma del Operador, lo que nos sería de fuerte ayuda para la cota que buscamos.

Para eso usamos un argumento espectral. Si a la función  $f$  la escribimos como su descomposición espectral en la base de las Funciones de Hermite, es decir

$$f = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{f}_k \phi_k$$

Entonces, usando que las Funciones de Hermite son autofunciones del operador  $O$ , tenemos

$$O(f) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{f}_k \lambda_k \phi_k, \quad \lambda_k = k + \frac{1}{2}$$

por lo que la norma quedaría

$$\|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |\hat{f}_k|^2 \lambda_k^2$$

Y ya vemos que acota a la norma de la función pues

$$\|f\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |\hat{f}_k|^2 = 2 \sum_{k=0}^{\infty} |\hat{f}_k|^2 \frac{1}{2} \leq 2 \sum_{k=0}^{\infty} |\hat{f}_k|^2 \lambda_k^2 = 2 \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Reemplazando en la cota del gradiente y de  $xf$  tenemos entonces que

$$\|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \sqrt{2} \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2$$

y

$$\|xf\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \sqrt{2} \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Ahora sí, podemos usar estos resultados auxiliares para probar la desigualdad que buscamos. Empecemos por

$$\langle -\Delta f + x^2 f; -\Delta f \rangle = \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \langle x^2 f; -\Delta f \rangle = \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \langle x^2 \nabla f; \nabla f \rangle + \langle 2xf; \nabla f \rangle \quad (6.39)$$

donde en el producto escalar entre  $x^2 f$  y el Laplaciano usamos nuevamente integración por partes.

Usando entonces en la última igualdad que  $\langle x^2 \nabla f; \nabla f \rangle$  es no negativo (pues es la integral de un argumento no negativo, un producto de cuadrados) y usando la desigualdad de Schwarz para acotar el producto escalar por debajo obtenemos

$$\langle -\Delta f + x^2 f; -\Delta f \rangle \geq \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2 - 2 \|xf\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}$$

Juntando,

$$\|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} \geq |\langle -\Delta f + x^2 f; -\Delta f \rangle| \geq \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2 - 2 \|xf\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}$$

De donde

$$\|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} + 2 \|xf\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)} \geq \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Usando la desigualdad de Young (en su forma más básica) en la multiplicación del primer término, y la cota que obtuvimos para ambos factores del producto en el segundo término tenemos

$$\frac{1}{2} \left( \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + 2 \left( \sqrt{2} \|O(f)\|_{L^2(\Omega)} \right) \geq \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2$$

De donde concluimos

$$\left(\frac{1}{2} + 2\sqrt{2}\right) \|O(f)\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq \frac{1}{2} \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Que ya nos da la cota que necesitábamos, pues, habiendo acotado uno de los dos términos que queríamos por una constante y la norma del operador, el otro es inmediato ya que

$$\|x^2 f\|_{L^2(\Omega)} = \|-\Delta f + x^2 f + \Delta f\|_{L^2(\Omega)} \leq \|-\Delta f + x^2 f\|_{L^2(\Omega)} + \|-\Delta f\|_{L^2(\Omega)} \quad (6.40)$$

Y ambos términos de la derecha los tenemos dominados por la norma del Operador.

Tenemos entonces dominados ambos términos de la norma del espacio intersección por la norma del Operador y, por lo tanto, dominada la norma del espacio intersección por la norma del Operador. Concluimos entonces la demostración de la equivalencia de las normas y, por lo tanto, obtenemos que ambos espacios son iguales y es teóricamente válido aplicar sucesivamente los operadores (vale mencionar que, dada la generalidad dimensional de ésta demostración, vale también en dimensiones mayores y por lo tanto se extiende su validez a los métodos en 2D y 3D). Termina entonces la presentación del método 1D. Efectivamente está bien definido, pasemos a exponer los argumentos de estabilidad y convergencia de éste método.

#### 6.4.2. Estabilidad del método de splitting pseudoespectral de Hermite para 1D

Veamos que el método propuesto es incondicionalmente estable, es decir en todos los pasos conserva la norma del dato inicial. Más exactamente:

$$\|\psi^n\|_{l^2}^2 = \|\psi_0\|_{l^2}^2 \quad n = 0, 1, \dots \quad (6.41)$$

donde

$$\|\psi^n\|_{l^2}^2 = \sum_{k=0}^N \omega_k^z |\psi_k^n|^2$$

y

$$\|\psi_0\|_{l^2}^2 = \sum_{k=0}^N \omega_k^z |\psi_0(z_k)|^2$$

Para empezar, tenemos  $\|\psi^n\|_{l^2}^2 = \sum_{k=0}^N \omega_k^z |\psi_k^n|^2$ , veamos qué le pasa en cada paso de la iteración a los  $|\psi_k^n|^2$  para ver que la suma no se altera.

Vemos que en los pasos impares del método,  $\psi_k^n$  es multiplicado por una exponencial de la forma  $e^{ix}$ ,  $x \in \mathbb{R}$  es decir una rotación, un número complejo de módulo 1, que no afecta para nada el valor de  $|\psi_k^n|^2$  y por lo tanto tampoco de la suma final que da la norma cuadrada del vector.

Por otro lado, en los pasos pares del método por definición tenemos lo siguiente(dejamos de forma



ilustrativa el paso 4)

$$\begin{aligned}
|(\psi^{(4)})|^2 &= \sum_{k=0}^N \omega_k^z |\psi_k^{(4)}|^2 \\
&= \sum_{k=0}^N \omega_k^z \left| \sum_{l=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_l h_l(z_k) \right|^2 \\
&= \sum_{k=0}^N \omega_k^z \left( \sum_{l=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_l h_l(z_k) \right) \overline{\left( \sum_{m=0}^N e^{-i2w_4 u_m^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_m h_m(z_k) \right)} \\
&= \sum_{l=0}^N \sum_{m=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_l e^{i2w_4 u_m^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_m \left( \sum_{k=0}^N \omega_k^z h_l(z_k) h_m(z_k) \right) \\
&= \sum_{l=0}^N \sum_{m=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_l e^{i2w_4 u_m^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_m * \delta_{lm} \\
&= \sum_{l=0}^N |\widehat{(\psi^{(3)})}_l|^2 \\
&= |\widehat{(\psi^{(3)})}|^2 \\
&= |(\psi^{(3)})|^2
\end{aligned} \tag{6.42}$$

Donde la  $\delta_{lm}$  la obtuvimos usando (6.37) y el último paso vale en virtud del conocido Teorema de Plancherel para sistemas ortonormales, sobre la igualdad entre la norma de una función y de su transformada.

Hemos llegado entonces a que el paso par preserva la norma del paso impar (pues llega a ella) y como a su vez el paso impar ya vimos que mantenía la norma también, vemos que el método preserva todo el tiempo la norma y que, por lo tanto, en cada paso tiene la norma  $l^2$  del dato inicial, probando la estabilidad que queríamos.

Vale la pena hacer una observación sobre el método en 2D y 3D. Notemos que la estabilidad de los pasos impares, que como dijimos sale de la exponencial, se debe mantener en mayores dimensiones ya que el splitting se plantea hecho de forma análoga y el que llamamos operador A, como mencionamos, se mantiene igual y con la misma solución. Es decir, ya podemos ver que el método en mayores dimensiones tiene el mismo subproblema A y entonces el método de splitting tiene los mismos pasos impares, contruidos de la misma forma, y que por lo tanto ya vimos que mantienen la norma. Por otro lado, en mayores dimensiones, el operador B sí será distinto, pero el subproblema B se soluciona también mediante una propuesta espectral para diferentes bases ortonormales de funciones tal como en este caso. Como los argumentos que dimos para la estabilidad de los pasos pares fueron generalidades de éstos sistemas junto con la Identidad de Párseval (que vale para cualquier sistema ortonormal), es evidente que éstos argumentos valdrán también para las GPE en 2D y 3D y que se podría descontar la estabilidad también en los pasos pares y, por lo tanto, concluir entonces que el método que presentamos es también estable en dimensiones mayores.

### 6.4.3. Convergencia del método de splitting pseudoespectral de Hermite para 1D

Una pregunta tan importante como la estabilidad es la de la convergencia del método que estamos proponiendo. Para la demostración, remitimos a ([5]) que, en la sección 4, discute casos generales de un problema como éste. Es decir, problemas donde, además de tener que probar la convergencia del splitting, en el sentido de probar que aplicaciones sucesivas de flujos de subproblemas sea una buena aproximación del flujo original del problema (prueba cuyas inconvenientes ya mencionamos), tenemos que, en realidad, ni siquiera estamos usando la solución exacta del subproblema B sino que estamos haciendo una proyección (no ortogonal) sobre el subespacio generado por finitas autofunciones que tomamos de la base de autofunciones del operador. Veamos que efectivamente caemos en las hipótesis del Teorema 4.1, mencionado en la publicación, que justifica la convergencia necesitada en nuestro método. Lo haremos viendo que el problema descrito en el caso general abarca nuestro caso. Vamos a ir analogando la terminología de la publicación con la de nuestro problema, para ver cómo todo lo que se requiere para el problema está en nuestro caso.

Nuestro espacio de trabajo, primer punto que especifica el Teorema, el espacio en el que buscamos la solución, es  $X = H^2(\Omega) \cap L_2^2(\Omega)$ . La base ortonormal de funciones que se necesita como hipótesis es por supuesto la base de autofunciones  $h_l(z)$  del operador  $B$ . Respecto de los autovalores de estas autofunciones, el teorema pide que tengan parte real acotada. Esto último los autovalores  $\mu_l$  que obtuvimos, tal como formulamos el problema, no parecen cumplirlo, pero es porque tenemos la ecuación diferencial en derivadas parciales expresada como la unidad imaginaria por la derivada temporal igualado al operador  $B$ . Si despejamos la derivada temporal pasando la unidad imaginaria queda un operador que tiene autovalores imaginarios puros y, por lo tanto, cumple la hipótesis. Dicho esto, seguimos adelante con la terminología, debemos considerar también el espacio

$$X_k = \{u \in X : \sum_{l \in \mathbb{N}} |\mu_l|^{2k} |< h_l; u >|^2 < \infty\} \quad (6.43)$$

que es un espacio más chico dentro de nuestro espacio de trabajo  $X$ , integrado por las funciones de nuestro espacio que además de poder ser descompuestas en la base, la serie de los coeficientes de esa descomposición en módulo cuadrado va a converger incluso aumentada por los autovalores elevadas a potencias crecientes. Es claramente un espacio más chico, contenido en el original, de condición más restrictiva. A continuación debemos considerar además la proyección  $P^M$  sobre el espacio generado por nuestras primeras  $M$  funciones de la base que estamos usando para construir nuestra solución finita. Ahí es importante prestar atención al Remarcado 4.2 de la publicación. Éste señala que si tomamos esas funciones y consideramos la proyección de una función  $u$  dada por

$$P^M u = \sum_{l=1}^M < \mu_l; u > h_l \quad (6.44)$$

donde  $\mu_l$  son los elementos de la base dual asociada a esas  $h_1, \dots, h_M$  autofunciones de la base, entonces  $P^M u$  es también una proyección que nos sirve para caer bajo las hipótesis del teorema (aunque no sea una proyección ortogonal). En nuestro caso, esos funcionales que componen la base dual de nuestra base serían los ya mencionados funcionales 'aplicar la transformada discreta' dados por:

$$< \mu_l; u > := \mu_l(u) = \sum_{k=0}^M h_l(z_k) u(z_k) w_k \quad (6.45)$$

(notar que entonces estamos usando ' $\langle \rangle$ ' como la notación usual para bases duales, de aplicar el funcional que está primero en la función que está después). Recapitulando, entonces esta proyección, que es la que nosotros usamos para construir el método y nuestra propuesta de solución al subproblema B en (6.36), sirve como proyección a los fines del Teorema 4.1. Más aún, el Remarcado 4.2 nos dice que la solución discreta que se propone para el subproblema del operador B se obtendrá multiplicando a las funciones de la base por unos coeficientes temporales que solucionan una ecuación diferencial ordinaria. Ésta ecuación es tener, tal como nos pasó en nuestro caso particular en (6.33), la derivada respecto del tiempo del  $l$ -ésimo coeficiente igualada al  $l$ -ésimo coeficiente de la solución discreta propuesta (coeficientes multiplicados por elementos de la base) luego de ser evaluada en el operador B.

El Teorema 4.2 nos dice entonces que, dada una ecuación  $iu_t = Au + Bu$  como la que tenemos, donde  $A : X \rightarrow X$  sea un mapeo localmente Lipschitz (cosa que en nuestro caso sucede, como ya probamos con anterioridad) y B un operador autoadjunto que cumple las condiciones que mencionamos arriba, si tenemos  $X_k^M = P^M X_k$  y  $U_0 \in X_k^M$  con  $M$  suficientemente grande tal que la diferencia  $\|U_0 - u_0\|_{X_k}$  entre  $U_0$  y el verdadero dato inicial sea chica, entonces la diferencia

$$\|U_n - u_n\|_{X_k}$$

será tan chica como se quiera (importante notar que entonces  $\|U_n - u_n\|_{X_k}$  también será tan chica como se quiere). Es decir, agrandando el  $M$  (tomando más funciones para la base de nuestro subespacio finito) podemos hacer que la diferencia entre la proyección del dato inicial y el dato inicial sea realmente chica y eso hará que la diferencia entre nuestra solución construida y la verdadera solución sea arbitrariamente chica, para un tiempo deseado. Ésto es tener garantizada la convergencia del método, que es lo que queríamos.

Concluye esto la exposición del Método pseudoespectral de Hermite en 1D, su estabilidad y convergencia.

## 6.5. Método pseudoespectral de Laguerre para la GPE 2D con simetría radial

Siguiendo con el orden ascendente en dimensión, habiendo presentado el método en 1D, pasamos ahora a exponer brevemente el *Método pseudoespectral de Laguerre* en 2D. En este caso de GPE 2D recordemos que  $\gamma_x = \gamma_y$ , de ahí la simetría radial. Por ende, el dato inicial se reduce a  $\psi_0(x, y) = \psi_0(r)$  con la definición usual de  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Más en general, reemplazando las dos variables espaciales en la función de onda y usando la expresión canónica del laplaciano radial en polares, la ecuación 6.22 queda en este caso:

$$i \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = B\psi(r, t) = -\frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial r} \right) + \frac{\gamma_r^2 r^2}{2} \psi(r, t); \quad 0 < r < \infty \quad (6.46)$$

O equivalentemente

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{2r} \left[ \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial r} + r \frac{\partial^2 \psi(r, t)}{\partial r^2} \right] + \frac{\gamma_r^2 r^2}{2} \psi(r, t) \\ &= -\frac{1}{2r} \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial r} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\gamma_r^2 r^2}{2} \psi(r, t) \end{aligned} \quad (6.47)$$

Análogamente al caso 1D, considerando que la ecuación está planteada para  $r$  en los reales no negativos y considerando también la forma del operador de la ecuación diferencial, que es también un operador muy conocido, resulto propicio el uso de los Polinomios y Funciones de Laguerre. Observemos que por definición son autofunciones de un operador que no es exactamente el B que nos quedó pero tampoco es tan distinto. Proponiendo, como hicimos en el caso 1D, funciones escaladas a partir de los polinomios, podemos encontrar autofunciones del operador que sí tenemos. En efecto, sabiendo que los Polinomios de Laguerre cumplen las ecuaciones (2.4) y (2.5) (donde reemplazamos la  $x$  de la variable por  $r$ , con los mismos valores de dominio), definimos las Funciones Escaladas de Laguerre como

$$L_m(r) = \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \hat{L}_m(\gamma_r r^2), \quad 0 \leq r < \infty \quad (6.48)$$

donde notamos con  $\hat{L}$  a los polinomios usuales de Laguerre. Veamos que efectivamente estas funciones propuestas cumplen ser autofunciones del operador de nuestro problema. Tenemos, dada la definición de  $L_m(r)$  que

$$L'_m(r) = \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \left[ -\gamma_r r \hat{L}_m(\gamma_r r^2) + 2\gamma_r r \hat{L}'_m(\gamma_r r^2) \right] \quad (6.49)$$

y que

$$L''_m(r) = \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \left[ (\gamma_r^2 r^2 - \gamma_r) \hat{L}_m(\gamma_r r^2) + (2\gamma_r - 4\gamma_r^2 r^2) \hat{L}'_m(\gamma_r r^2) + 4\gamma_r^2 r^2 \hat{L}''_m(\gamma_r r^2) \right] \quad (6.50)$$

Usando la ecuación que define a los Polinomios de Laguerre (2.4) podemos despejar esa segunda derivada solamente en términos de  $\hat{L}_m$  y su primera derivada, obteniendo

$$L''_m(r) = \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \left[ (\gamma_r^2 r^2 - \gamma_r - 4\gamma_r m) \hat{L}_m(\gamma_r r^2) + (-2\gamma_r) \hat{L}'_m(\gamma_r r^2) \right] \quad (6.51)$$

Ahora que tenemos escritas la Función Escalada de Laguerre y sus derivadas podemos reemplazar en el lado derecho de la ecuación 6.46 y efectivamente obtenemos que

$$-\frac{1}{2r} L'_m - \frac{1}{2} L''_m + \frac{\gamma_r^2 r^2}{2} L_m = \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} (\gamma_r \hat{L}_m + 2\gamma_r m \hat{L}_m) = L_m \gamma_r (2m + 1) \quad (6.52)$$

Obtuvimos entonces que efectivamente las funciones propuestas son autofunciones del operador que tenemos en (6.46) con autovalor  $\mu_m = \gamma_r (2m + 1)$ . Notar que además, con el siguiente producto interno, usando la propiedad (2.5), resultan ser además estas funciones una base ortonormal:

$$\begin{aligned} 2\pi \int_0^\infty L_m(r) L_n(r) r dr &= 2\pi \int_0^\infty \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \hat{L}_m(\gamma_r r^2) \sqrt{\frac{\gamma_r}{\pi}} e^{-\gamma_r r^2/2} \hat{L}_n(\gamma_r r^2) r dr = \\ &= \int_0^\infty (2\gamma_r r) e^{-\gamma_r r^2} \hat{L}_m(\gamma_r r^2) \hat{L}_n(\gamma_r r^2) dr \\ &= \int_0^\infty \hat{L}_m(x) \hat{L}_n(x) e^{-x} dx \\ &= \delta_{mn} \end{aligned} \quad (6.53)$$

Mostramos, por lo tanto, lo que necesitábamos.

Sea entonces  $M \in \mathbb{N}$ , sea  $Y_M$  el subespacio generado por las primeras  $M + 1$  funciones de la base ortonormal antes presentada. El método espectral de Laguerre consiste en encontrar, como antes en 1D,  $\psi_M(r, t) \in Y_M$  dado por

$$\psi_M(r, t) = \sum_{m=0}^M \hat{\psi}_m(t) L_m(r), \quad 0 \leq r < \infty \quad (6.54)$$

Tal como en el caso 1D, esas funciones del tiempo serán los coeficientes de la proyección (no ortogonal, por el mismo motivo) de nuestra función dato inicial sobre ese subespacio  $Y_M$ . Insertamos entonces esta propuesta de solución en nuestra ecuación, la 6.46. Imponiendo que la cumpla y usando que las Funciones Escaladas de Laguerre son, como probamos, una base ortonormal, obtenemos

$$i \frac{d\hat{\psi}_m(t)}{dt} = \mu_m^r \hat{\psi}_m(t) = \gamma_z(2m + 1) \hat{\psi}_m(t), \quad m = 0, 1, \dots, M \quad (6.55)$$

La solución que obtenemos entonces para el operador B en este caso es:

$$\psi_M(r, t) = e^{-iB(t-t_s)} \psi_M(r, t_s) = \sum_{m=0}^M e^{-i\mu_m^r(t-t_s)} \hat{\psi}_m(t_s) L_m(r) \quad (6.56)$$

Ahora que tenemos la solución a este subproblema, recordemos que la solución al otro subproblema (el subproblema del operador que llamamos operador A) es literalmente la misma. Por lo tanto, ya estamos en condiciones de escribir cómo queda el método de Splitting temporal de cuarto orden pseudoespectral de Laguerre para la GPE 2D con simetría radial:

$$\begin{aligned} \psi_j^{(1)} &= e^{-i2w_1 \Delta t \beta_1 |\psi_j^n|^2} \psi_j^n \\ \psi_j^{(2)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(1)})_l} L_l(r_j) \\ \psi_j^{(3)} &= e^{-i2w_3 \Delta t \beta_1 |\psi_j^{(2)}|^2} \psi_j^{(2)} \\ \psi_j^{(4)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_4 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})_l} L_l(r_j), \quad j = 0, 1, \dots, N \\ \psi_j^{(5)} &= e^{-i2w_3 \Delta t \beta_1 |\psi_j^{(4)}|^2} \psi_j^{(4)} \\ \psi_j^{(6)} &= \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2 u_l^z \Delta t} \widehat{(\psi^{(5)})_l} L_l(r_j) \\ \psi_j^{n+1} &= e^{-i2w_1 \Delta t \beta_1 |\psi_j^{(6)}|^2} \psi_j^{(6)} \end{aligned} \quad (6.57)$$

Donde estamos notando  $\psi_j^n$  a la aproximación de  $\psi(r_j, t_n)$  y  $\psi^n$  al vector solución con coordenadas  $\psi_j^n$ . Siguiendo las analogías con el caso 1D, los puntos  $r_j$  que usamos están definidos respecto de los puntos usuales de cuadratura de Gauss-Laguerre  $\hat{r}_j$  mediante:

$$r_j = \sqrt{\frac{\hat{r}_j}{\gamma_r}} \quad (6.58)$$

En base a estos mismos puntos y a los pesos estándar de la cuadratura  $\hat{w}_j^r$  es que también definimos los pesos para nuestra transformada discreta de Laguerre

$$w_j^r = \frac{\pi}{\gamma_r} \hat{w}_j^r e^{\hat{r}_j} \quad (6.59)$$

y entonces la Transformada Discreta queda

$$\hat{U}_l = \sum_{j=0}^M w_j^r U(r_j) L_l(r_j), \quad l = 0, 1, \dots, M \quad (6.60)$$

Esta definición efectivamente funciona puesto que

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^M w_j^r L_m(r_j) L_n(r_j) &= \sum_{j=0}^M \frac{\pi}{\gamma_r} \hat{w}_j^r e^{\hat{r}_j} L_m \left( \sqrt{\frac{\hat{r}_j}{\gamma_r}} \right) L_n \left( \sqrt{\frac{\hat{r}_j}{\gamma_r}} \right) \\ &= \sum_{j=0}^M \hat{w}_j^r \hat{L}_m(\hat{r}_j) \hat{L}_n(\hat{r}_j) \\ &= \delta_{nm} \end{aligned} \quad (6.61)$$

Donde se ve más claro por qué la elección de estos puntos y pesos escalados, ya que tanto la composición, como la fracción  $\frac{\pi}{\gamma_r}$  y la exponencial cumplen la función de simplemente cancelar lo que le agregamos a las Funciones Escaladas para que queden “limpios” los Polinomios de Laguerre con sus pesos, para obtener la Delta

La demostración de que éste método es incondicionalmente estable es completamente igual a la del caso de Hermite en 1D porque, como ya mencionamos en esa sección, valen todos los mismos argumentos para pasos pares e impares del método. Ésto mismo sucede con la demostración de convergencia, que es totalmente análoga. Concluimos entonces con la presentación, estabilidad y convergencia del Método en 2D.

## 6.6. Método pseudoespectral de Laguerre-Hermite para la GPE 3D con simetría cilíndrica

Concluimos el gradual ascenso en dimensión exponiendo el *Método pseudoespectral de Laguerre-Hermite* en 3D. Este caso es una combinación de los dos anteriores y como tal lo abordaremos. Combinaremos la solución de Hermite 1D en la recta  $z$  y la solución radial 2D en el plano  $xy$  aprovechando su simetría. Más exactamente, estamos tomando  $d = 3$  y  $\gamma_x = \gamma_y$  y por lo tanto, como antes,  $\psi_0(x, y, z) = \psi_0(r, z)$  y también la solución será  $\psi(x, y, z, t) = \psi(r, z, t)$ . Como ya hemos dicho, si pensamos toda nuestra ecuación como  $iu_t = f(u) = Au + Bu$  el operador A es exactamente el mismo en este caso que en los anteriores. Lo que cambia es el operador B que, usando la expresión del laplaciano en cilíndricas, queda:

$$i \frac{\partial \psi(r, z, t)}{\partial t} = B \psi(r, z, t) = -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi(r, z, t)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \psi(r, z, t)}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{2} (\gamma_r^2 r^2 + \gamma_z^2 z^2) \psi(r, z, t); \quad (6.62)$$

$$-\infty \leq z \leq \infty; \quad 0 < r < \infty; \quad t \geq 0, \quad \text{con } \gamma_r = \gamma_x = \gamma_y$$

Presentamos entonces para esta ecuación el método pseudoespectral de Laguerre-Hermite. Proponemos como autofunciones de este operador unas funciones que sean simplemente el producto de las Funciones Escaladas de Hermite que usamos en el problema 1D multiplicadas por las Funciones Escaladas de Laguerre que usamos en el problema 2D. Es decir

$$C_{ml}(r, z) = L_m(r)h_l(z) \quad (6.63)$$

y en efecto

$$\begin{aligned} BC_{ml}(r, z) &= -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_{ml}(r, z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_{ml}(r, z)}{\partial z^2} \right] + (\gamma_r^2 r^2 + \gamma_z^2 z^2) C_{ml}(r, z) \\ &= -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial L_m(r)}{\partial r} \right) + \left( \frac{1}{2} \gamma_r^2 r^2 \right) L_m(r) \right] h_l(z) + \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2 h_l(z)}{dz^2} + \frac{1}{2} \gamma_z^2 z^2 h_l(z) \right] L_m(r) \\ &= \mu_m^r L_m(r) h_l(z) + \mu_l^z h_l(z) L_m(r) \\ &= (\mu_m^r + \mu_l^z) C_{ml}(r, z) \end{aligned} \quad (6.64)$$

Donde en el último paso usamos que cada tipo de Funciones Escaladas eran autofunciones de cada uno de los operadores respectivos. Obtuvimos entonces que nuestra propuesta de función producto  $C_{ml}(r, z)$  es autofunción del operador B de la ecuación GPE 3D con simetría cilíndrica, de autovalor  $(\mu_m^r + \mu_l^z)$ . Dados  $M, N$  enteros no negativos fijos sea  $X_{MN}$  el subespacio generado

$$X_{MN} = \text{gen}\{L_m(r)h_l(z)/m = 0, 1, \dots, M; l = 0, 1, \dots, N\} \quad (6.65)$$

Entonces el método espectral de Laguerre-Hermite consiste en encontrar  $\psi_{MN}(r, z, t) \in X_{MN}$  que cumpla la ecuación del operador, es decir buscamos una propuesta de la forma

$$\psi_{MN}(r, z, t) = \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^N \hat{\psi}_{ml}(t) L_m(r) h_l(z) \quad (6.66)$$

que cumpla la ecuación (6.62). Insertando esta propuesta de solución en la ecuación e imponiéndole que la cumpla, usando que son variables separadas y por lo tanto que las Funciones Escaladas de otras variables salen de la derivación, obtenemos la siguiente EDO para los coeficientes temporales del método pseudoespectral

$$i \frac{d\hat{\psi}_{ml}(t)}{dt} = (\mu_m^r + \mu_l^z) \hat{\psi}_{ml} \quad (6.67)$$

Y por lo tanto la solución propuesta para el operador B queda

$$\psi_{MN}(r, z, t) = e^{-iB(t-t_s)} \psi_{MN}(r, z, t_s) = \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^N e^{-i(\mu_m^r + \mu_l^z)(t-t_s)} \hat{\psi}_{ml}(t_s) L_m(r) h_l(z); \quad t \geq t_s \quad (6.68)$$

Si llamamos  $\psi_{jk}^n$  a nuestra aproximación de  $\psi(r_j, z_k, t_n)$  y  $\psi^n$  al vector solución de coordenadas  $\psi_{jk}^n$ , el método completo de Splitting pseudoespectral de Laguerre-Hermite para la GPE 3D con simetría cilíndrica queda:

$$\begin{aligned}
\psi_{jk}^{(1)} &= e^{-i2w_1\Delta t\beta_3|\psi_{jk}^n|^2} \psi_{jk}^n \\
\psi_{jk}^{(2)} &= \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2(\mu_l^z + \mu_m^r)\Delta t} \widehat{(\psi^{(1)})}_{ml} L_m(r_j) h_l(z_k) \\
\psi_{jk}^{(3)} &= e^{-i2w_3\Delta t\beta_3|\psi_{jk}^{(2)}|^2} \psi_{jk}^{(2)} \\
\psi_{jk}^{(4)} &= \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^N e^{-i2w_4(\mu_l^z + \mu_m^r)\Delta t} \widehat{(\psi^{(3)})}_{ml} L_m(r_j) h_l(z_k), \quad j = 0, 1, \dots, M, \quad k = 0, 1, \dots, N \quad (6.69) \\
\psi_{jk}^{(5)} &= e^{-i2w_3\Delta t\beta_3|\psi_{jk}^{(4)}|^2} \psi_{jk}^{(4)} \\
\psi_{jk}^{(6)} &= \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^N e^{-i2w_2(\mu_l^z + \mu_m^r)\Delta t} \widehat{(\psi^{(5)})}_{ml} L_m(r_j) h_l(z_k) \\
\psi_{jk}^{n+1} &= e^{-i2w_1\Delta t\beta_3|\psi_{jk}^{(6)}|^2} \psi_{jk}^{(6)}
\end{aligned}$$

donde con  $\hat{U}_{ml}$  estamos diciendo los coeficientes de la transformada discreta escalada de Laguerre-Hermite. Ésta, en total analogía con el caso 1D y 2D y aprovechando también las variables separadas, está dada por

$$\hat{U}_{ml} = \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N w_j^r w_k^z U(r_j, z_k) L_m(r_j) h_l(z_k), \quad m = 0, 1, \dots, M; k = 0, 1, \dots, N \quad (6.70)$$

Donde los  $w_j^r$  y  $w_k^z$  son los pesos escalados de Laguerre y de Hermite respectivamente, que ya han sido presentados en las secciones anteriores. La validez de esta transformada se deduce de la misma forma que las anteriores. Usando que cada peso sirve para hacer que cada transformada valga la  $\delta$  correspondiente cuando hago el producto entre los de cada base ortonormal, puedo conseguir la delta primero entre unas funciones y luego entre las otras consiguiendo por lo tanto una delta general de la base de Laguerre-Hermite. En cuanto a la estabilidad, como ya sucedió en el caso 2D, es literalmente la misma que está hecha en detalle en el caso 1D. Los pasos impares preservan la norma porque simplemente multiplican por una exponencial de módulo 1 y los pasos pares lo hacen en virtud de las cuentas y de la Identidad de Parseval ya mencionadas. Lo mismo sucede con la convergencia.

Con ésto concluimos la exposición de los tres métodos, uno para cada dimensión espacial posible del espacio físico, su garantía de estabilidad y de convergencia.



# Parte V

## Implementación

### 7. Resultados

#### 7.1. Generalidades

En ésta sección discutiremos la implementación hecha para testear el método numérico objeto de éste trabajo. Por facilidad y dada la muchas veces mencionada analogía en la construcción de los diferentes casos, implementamos el caso 1D. El código fue escrito en Python, donde usamos las librerías de matemática usuales. Usamos, en particular, la librería “`scipy.special.hermite`” que tiene incorporados los Polinomios de Hermite como una forma práctica para construir de forma eficiente las Funciones de Hermite. Sin embargo usamos también el software Mathematica para obtener tanto las raíces como los pesos correspondientes a los Polinomios que trabajamos porque obteniéndolos a partir de pedir las raíces a la librería de Scipy daba un resultado erróneo. En líneas generales la implementación ha sido una directa escritura de las funciones, métodos y valores que fuimos exponiendo, usando vectores para los diferentes valores de las funciones y matrices para las transformaciones que se le aplican a esos vectores (como la Transformada de Hermite y su Transformada Inversa)

En todos los casos que abordamos con el fin de contrastar los resultados que daba el paper en el cuál nos basamos, su autor, Bao, comparaba la solución que le dan éstos métodos con la evolución temporal del estado fundamental que él obtuvo en otras publicaciones, usando diferentes métodos numéricos, para éstas mismas ecuaciones, (GPE en las diferentes dimensiones).

##### 7.1.1. Estado fundamental

Empezamos queriendo comparar con el primer ejemplo que el mencionado Bao, propone, que es el de la ecuación 1D tal como la reexpresamos en (6.15) tomando  $N = 129$ ,  $\beta = 50$ ,  $\gamma_z = 2$  y tomando como dato inicial  $\Psi_0(z)$  igual al estado fundamental de la GPE 1D con los mismos coeficientes. Sin embargo, acá debemos deternos. Recordemos primero que el estado fundamental de un sistema cuántico es un estado de mínima energía. Pero además, hay que mencionar que su obtención no es nada trivial dado un sistema arbitrario. Para obtenerlo, recurrimos a otras publicaciones de Bao que el autor autorreferencia. Encontramos en ([7]) un método numérico para calcularlo.

El método consiste, antes que nada, en formalizar qué es estado fundamental. Recordemos que cumple

$$\psi(z, t) = e^{-i\lambda t} \psi_0(z) \quad (7.1)$$

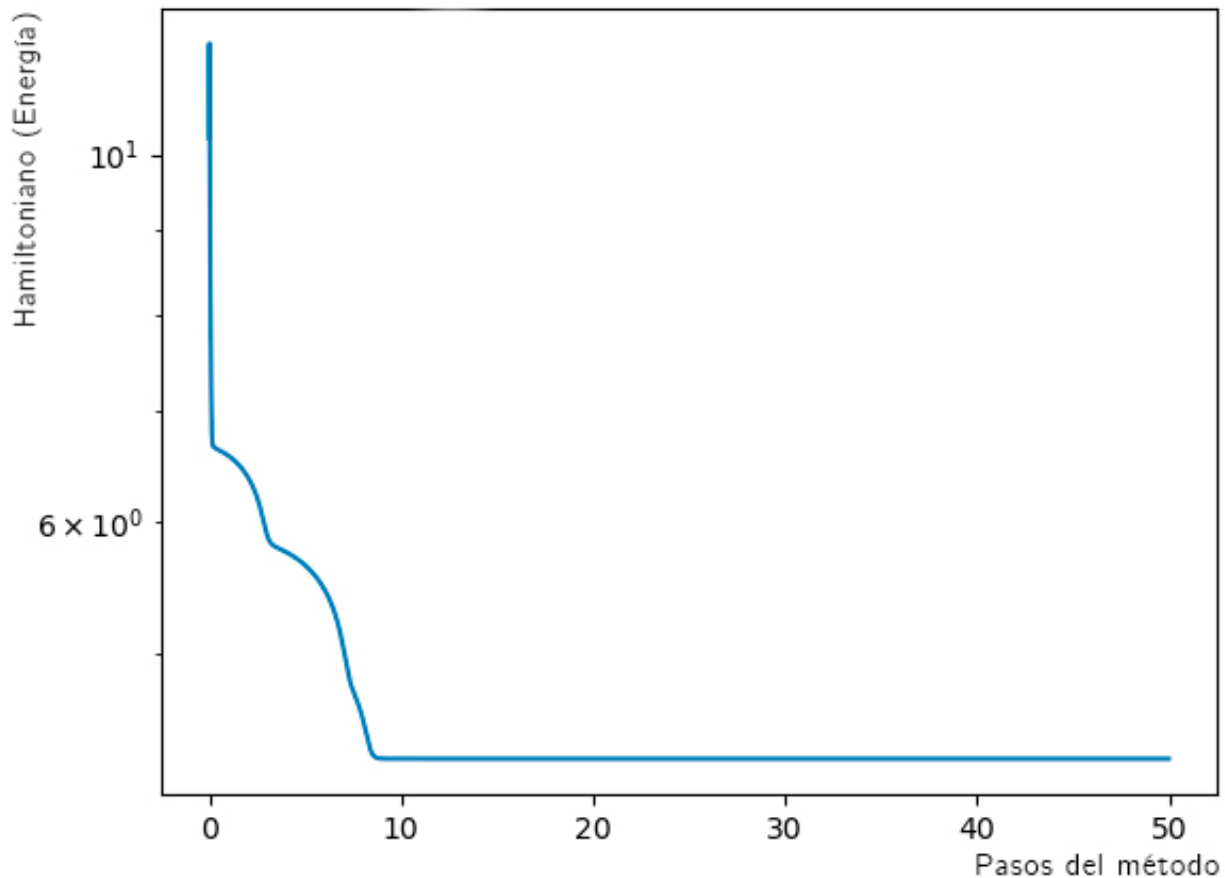
Es decir, que al evolucionar temporalmente solo le suceden rotaciones en el plano complejo. Luego, yendo a lo que más nos interesa, escribimos el funcional Hamiltoniano, que como mencionamos es una forma generalizada de energía. Queda como en esta ecuación

$$H(\psi) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + V_d(\mathbf{x}) |\psi|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi|^4 \quad (7.2)$$

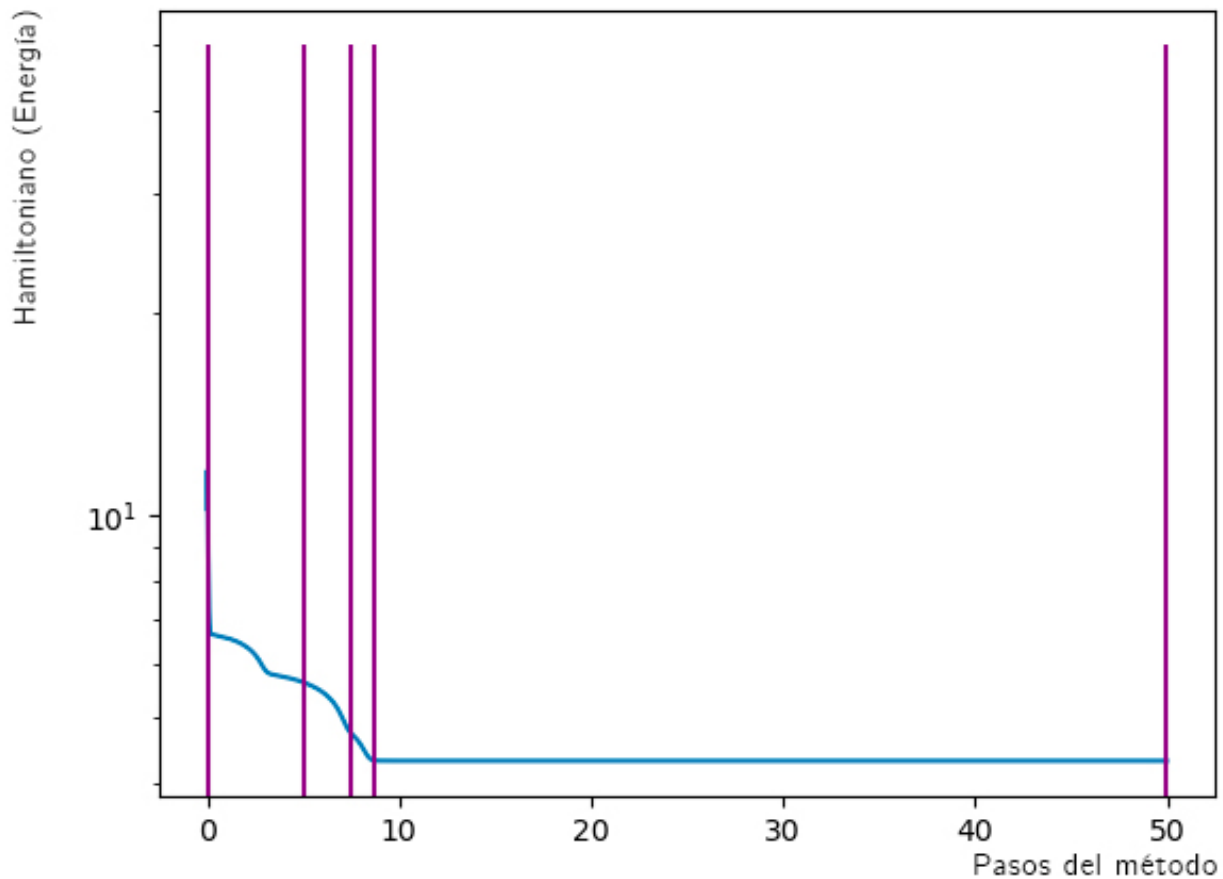
Conectemos ambas cosas. Como el estado fundamental es, por definición, un mínimo de éste funcional de energía y cumple una restricción, la normalización que le impusimos desde el principio (que integre 1), es natural buscarlo, en tanto mínimo sujeto a restricción, con el método de los multiplicadores de Lagrange. Éste punto es clave, conceptualmente simple y numéricamente también. En la publicación mencionada se detalla la búsqueda numérica de ese mínimo con el método descenso por gradiente que nosotros tomaremos como punto de comparación. Vale mencionar que corrimos la propuesta del autor tal como está.

Implementamos entonces ése método y obtuvimos los siguientes gráficos. Podemos ver en ellos la forma que va tomando la función, conforme vamos descendiendo en la dirección opuesta al gradiente, hasta estabilizarse en una buena aproximación del estado fundamental. En la primera figura a continuación, graficamos los valores del Hamiltoniano para la función que se tiene en cada iteración del método y, como se ve, nos muestra varios tramos de bajadas. Lo interesante es observar cómo la función resultante, en cada una de las bajadas, va teniendo menos cantidad de ceros, acorde a un resultado teórico de que el estado fundamental no puede tenerlos, y a que a medida que va descendiendo el valor del Hamiltoniano se va pareciendo cada vez más al estado buscado (un buen indicio). En el segundo gráfico marcamos qué momentos entre las bajadas tomamos como referencia.

## Evolución del método de búsqueda

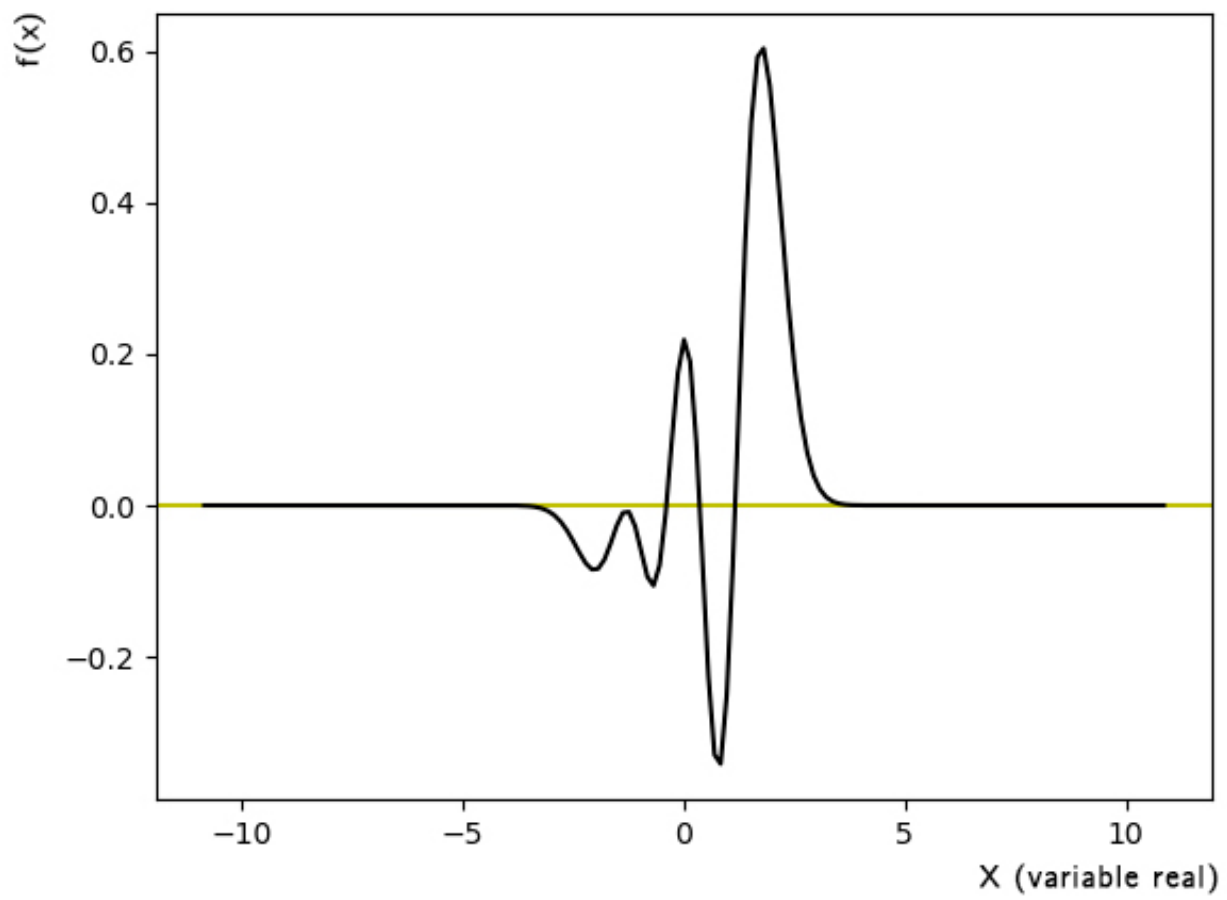


## Evolución del método con tiempos

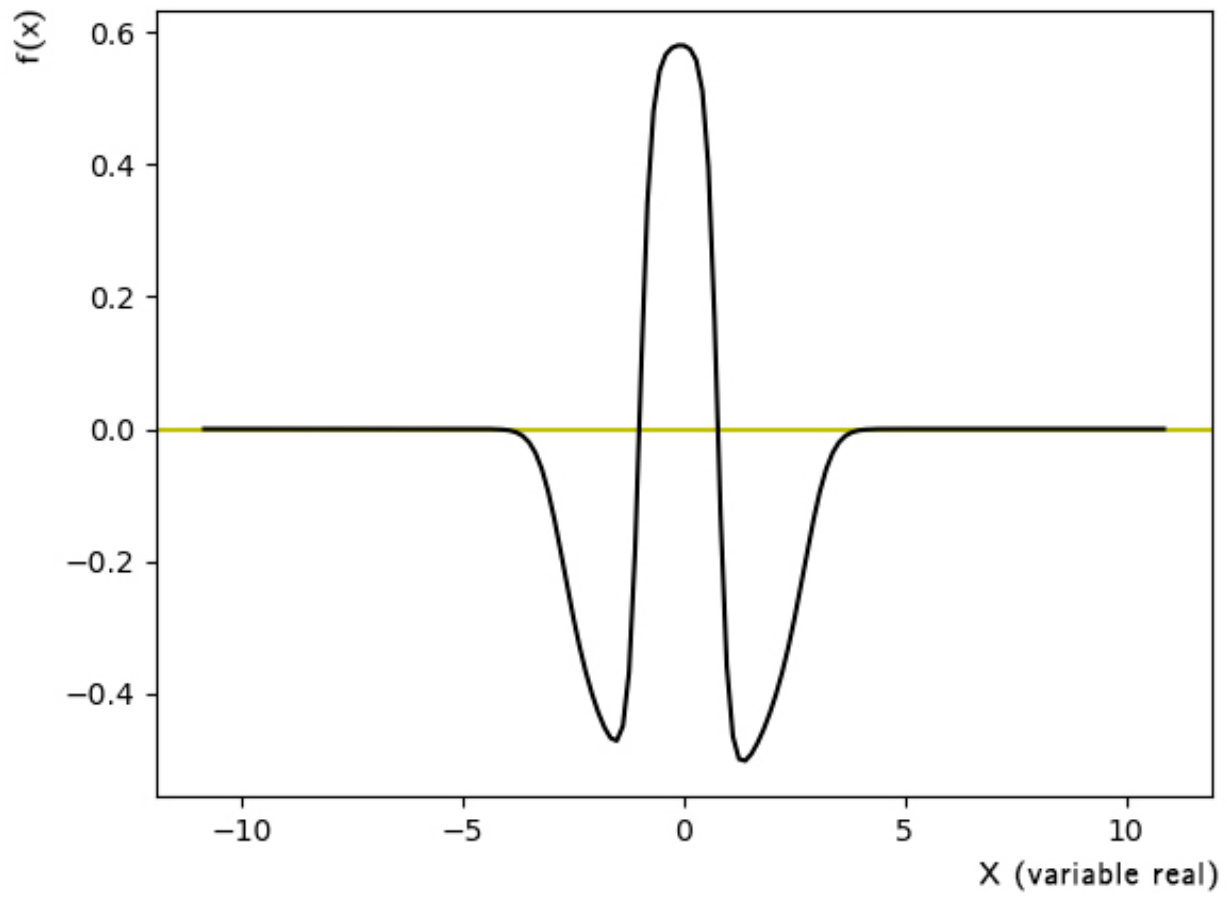


Los siguientes son los gráficos de la función que obtiene el método en cada uno de los momentos que están marcados. En ellos se ve esto que señalamos antes, como los descensos en el valor del Hamiltoniano corresponden a haber encontrado una función con menos energía/menos ceros, más cercana al verdadero estado fundamental (notar la segunda y tercera tienen diferente forma pero misma cantidad de ceros, las mostramos porque, pese a eso, pertenecen a bajadas distintas):

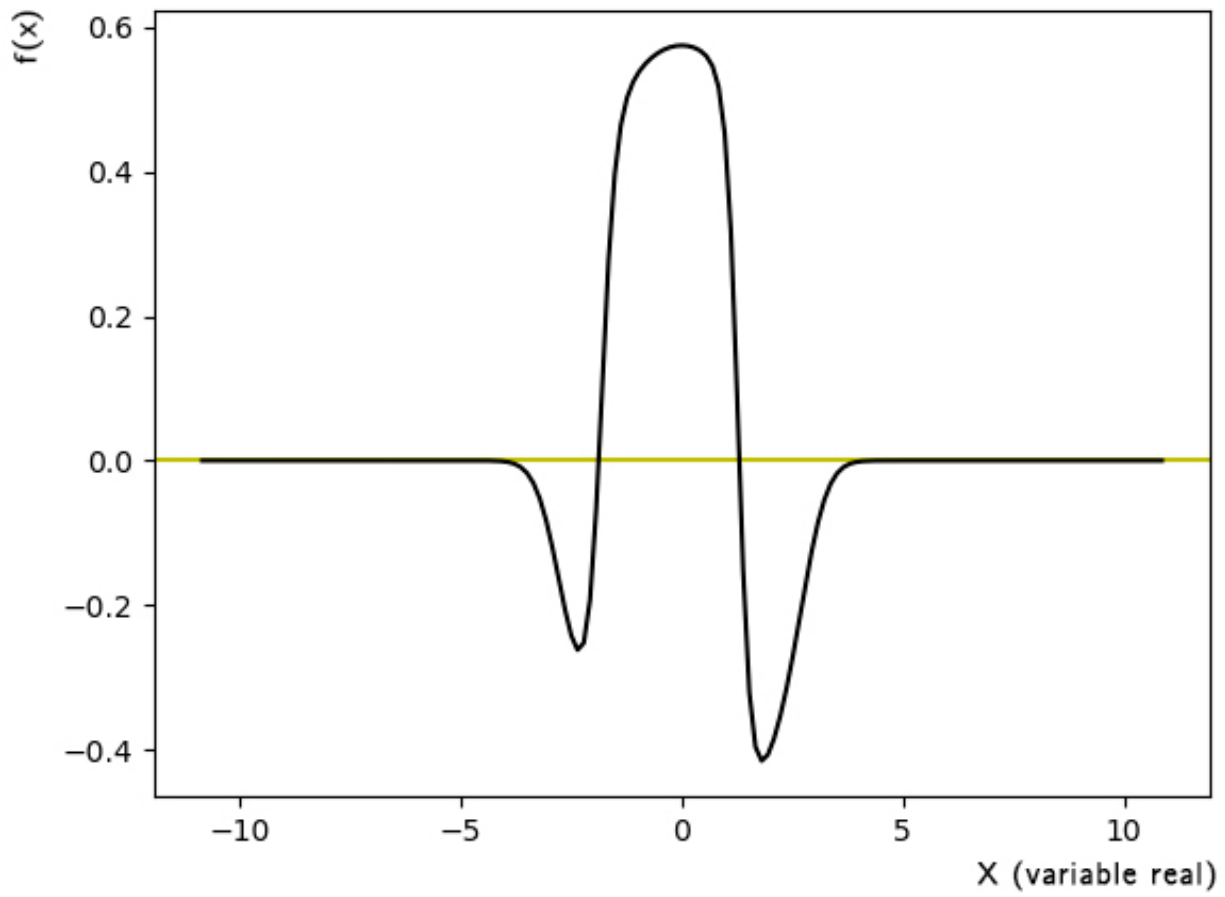
## Función en el tiempo inicial



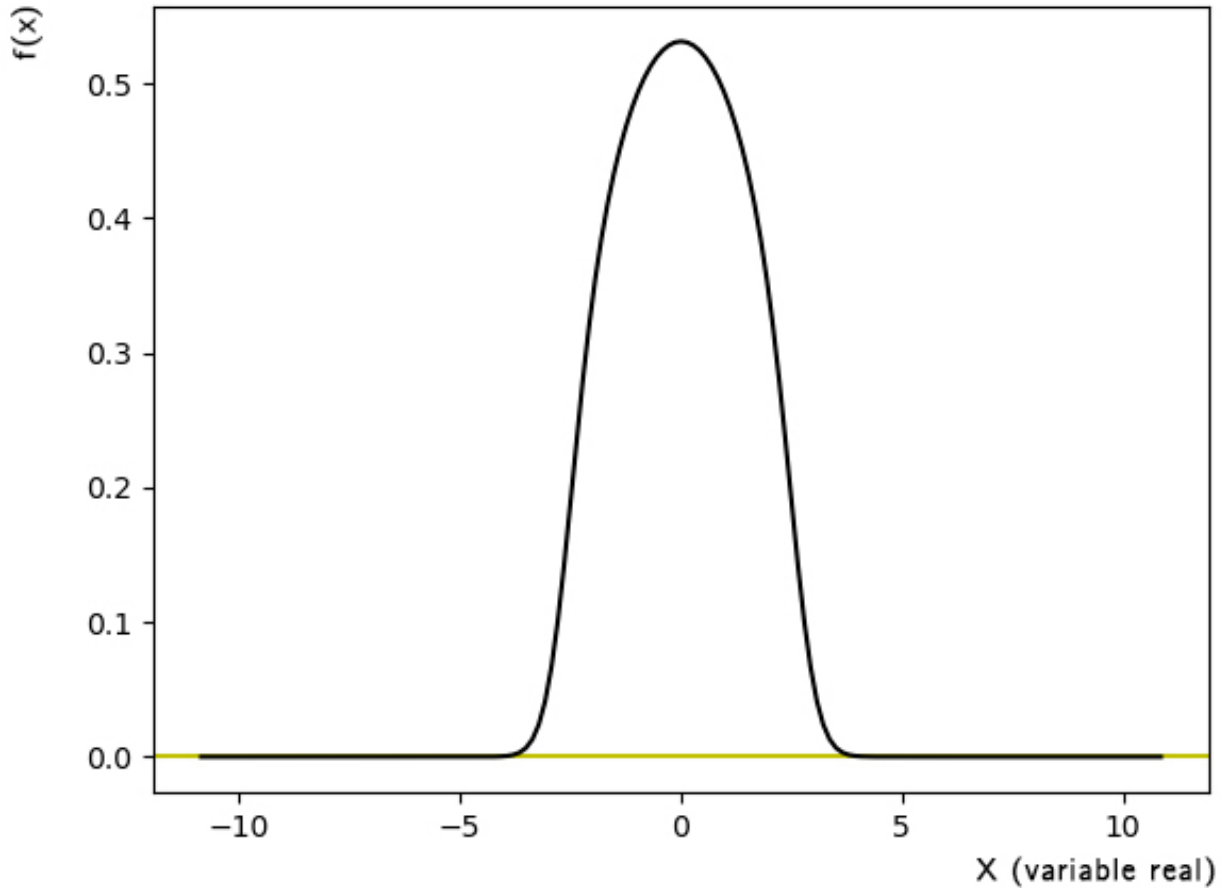
## Función en el tiempo t1



## Función en el tiempo t2



## Función en el tiempo $t_f$



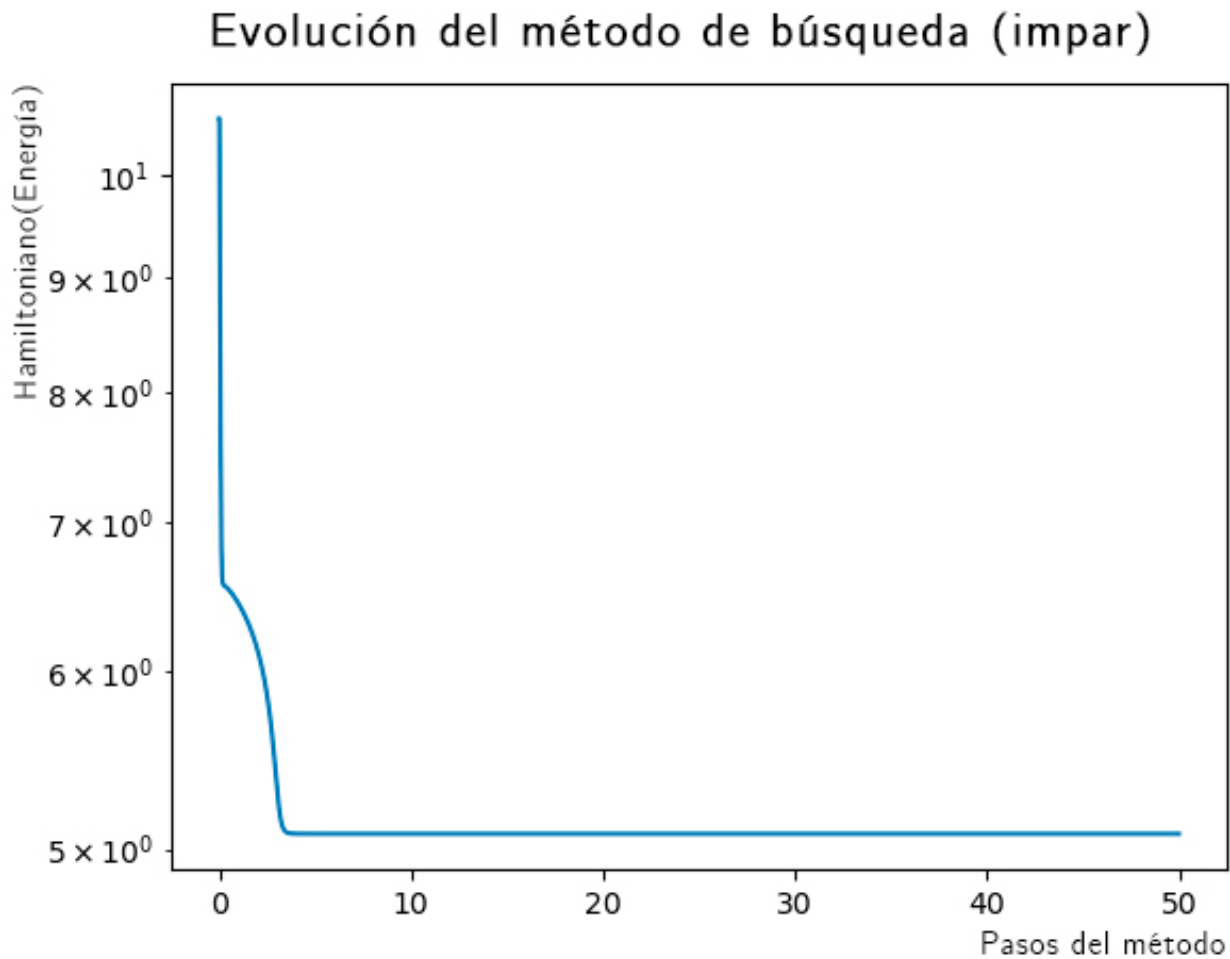
Éste último gráfico es con el que nos quedamos como aproximación, es al que llegamos cuando el Hamiltoniano, como se ve en los dos primeros gráficos, se ameseta. En cuanto a la "calidad" de este estado fundamental que obtuvimos, si bien es una aproximación a un objeto que no es encontrable analíticamente y, por lo tanto, nunca esperaríamos encontrarlo de forma exacta, tenemos varios indicadores de haber ido por buen camino.

En lo numérico, el gran amesetamiento en el Hamiltoniano luego de varias bajadas muestra, tanto que hemos descendido una cantidad considerable como que en un principio no parece posible descender más.

Por otro lado, vale mencionar que los gráficos anteriores se obtuvieron luego de correr el programa usando como dato inicial una combinación convexa de tres Funciones de Hermite, combinando funciones pares e impares. Ésta elección nos llevó a valores de mínimo más chicos (y por lo tanto mejores) que cuando tomamos sólo impares. Ésto es razonable ya que los operadores  $A$  y  $B$  que tenemos en nuestro problema (los que ya mencionamos en anteriores capítulos) y que aplicamos sucesivamente, mantienen la paridad de la función en la que se aplican. Por lo tanto, si iniciamos la evolución con una función dentro del subespacio de las Funciones de Hermite impares, nunca saldremos de éste subespacio. Es decir el método sólo nos podría dar en ese caso funciones impares. Pero esto sería un

problema, dado el antes mencionado resultado teórico de que el estado fundamental que buscamos, mínimo del funcional Hamiltoniano, no puede tener ceros. Es decir, que no puede ser una función impar. Por lo tanto empezar el método con una combinación de funciones de Hermite impares jamás nos dejaría llegar a buen puerto (o no al mejor posible al menos). Eso ya deja claro por qué fue mejor el resultado, es decir por qué dió un valor de Hamiltoniano más chico, cuando iniciamos el método con una combinación de pares e impares. Es decir las corridas que hicimos, respaldaron este resultado teórico.

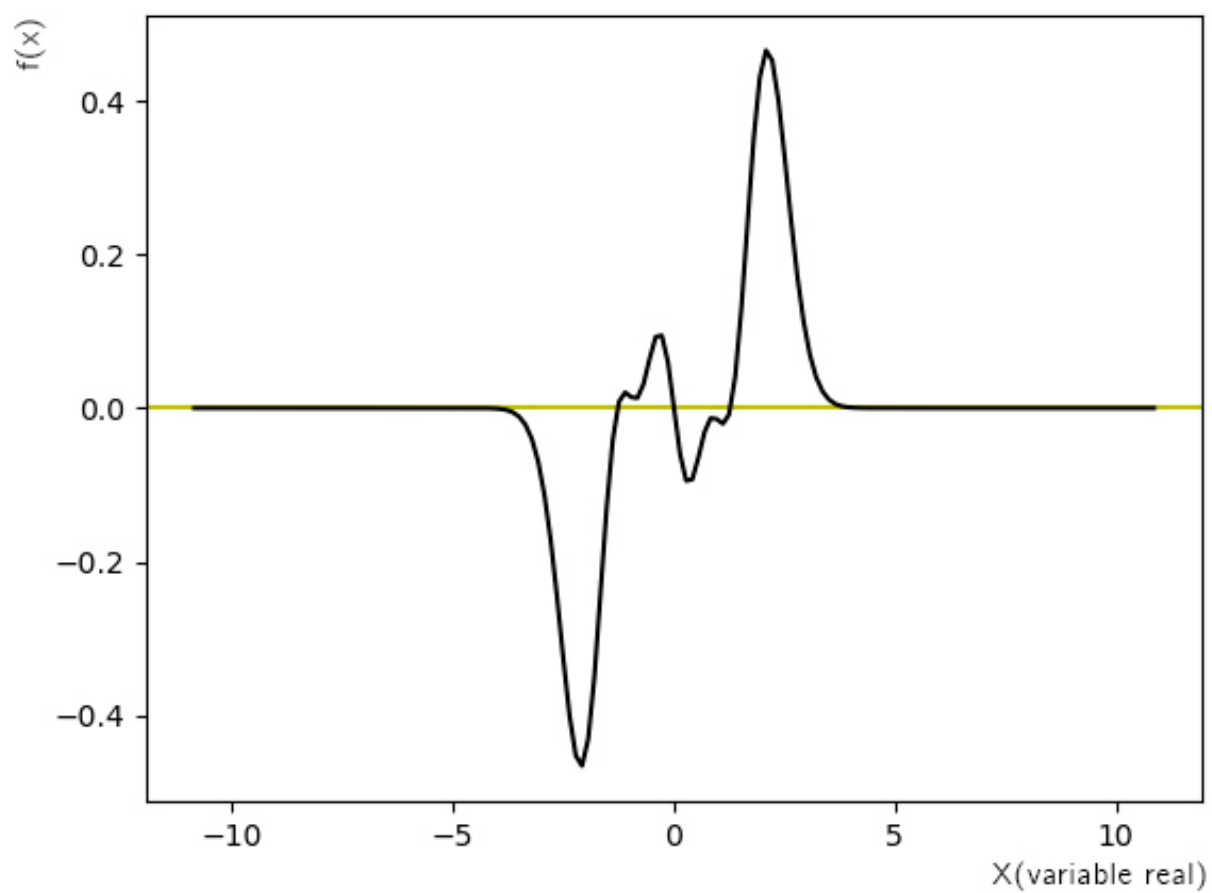
Efectivamente si iniciamos el método de minimización solamente con funciones impares obtenemos el siguiente Hamiltoniano:

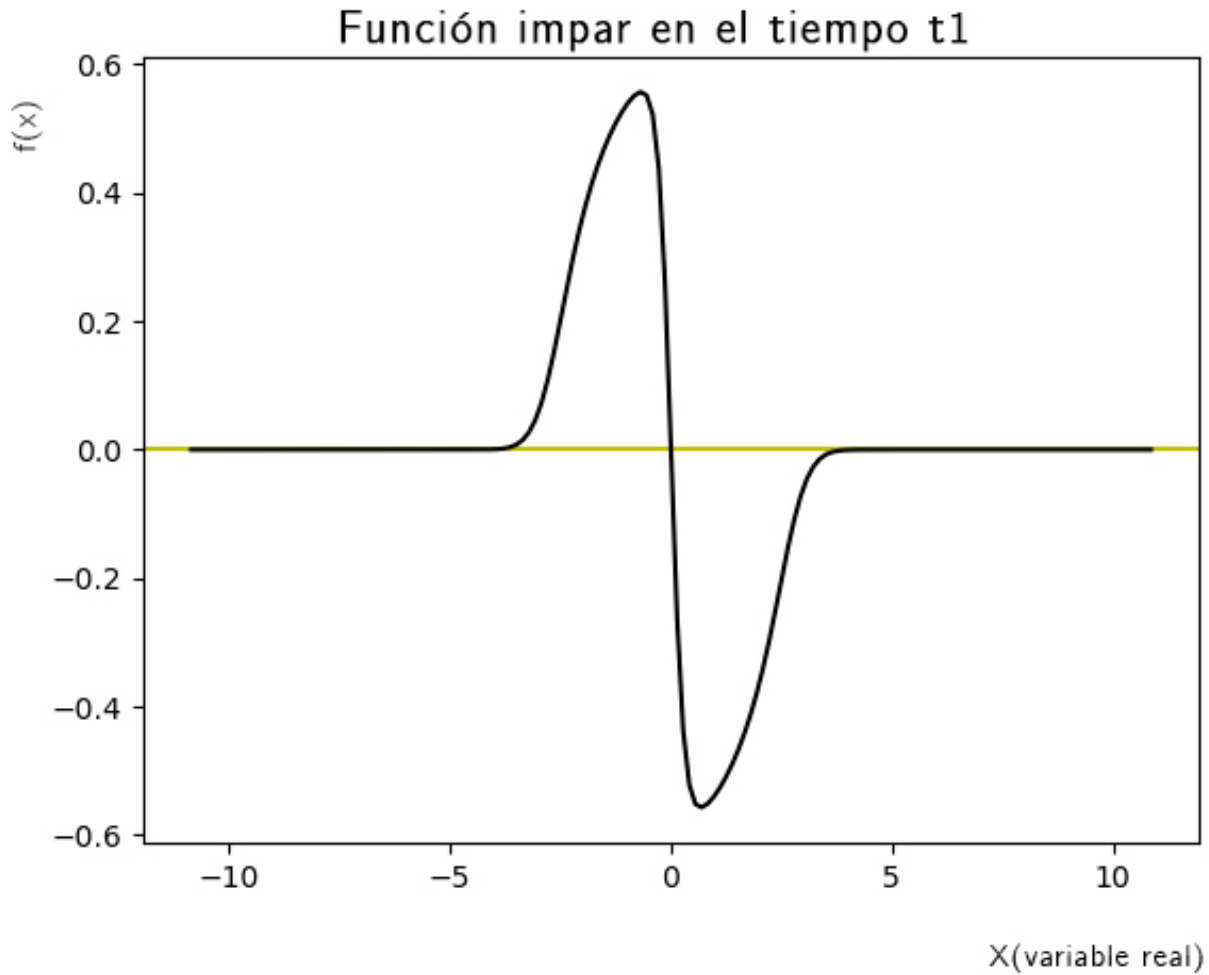


Como puede verse, hay una sola bajada y rápidamente el método se .ameseta.<sup>en</sup> el sentido de que, como vemos, el gráfico se ameseta, deja de haber cambio en el Hamiltoniano. Graficamos entonces el dato inicial (con tres ceros) y después el mínimo que se obtiene, con uno solo. Nótese que por lo dicho de funciones impares, la función que graficamos "salta" de tener 3 ceros a uno solo, ya que no puede tener dos y en uno se queda:



## Función impar en el tiempo inicial





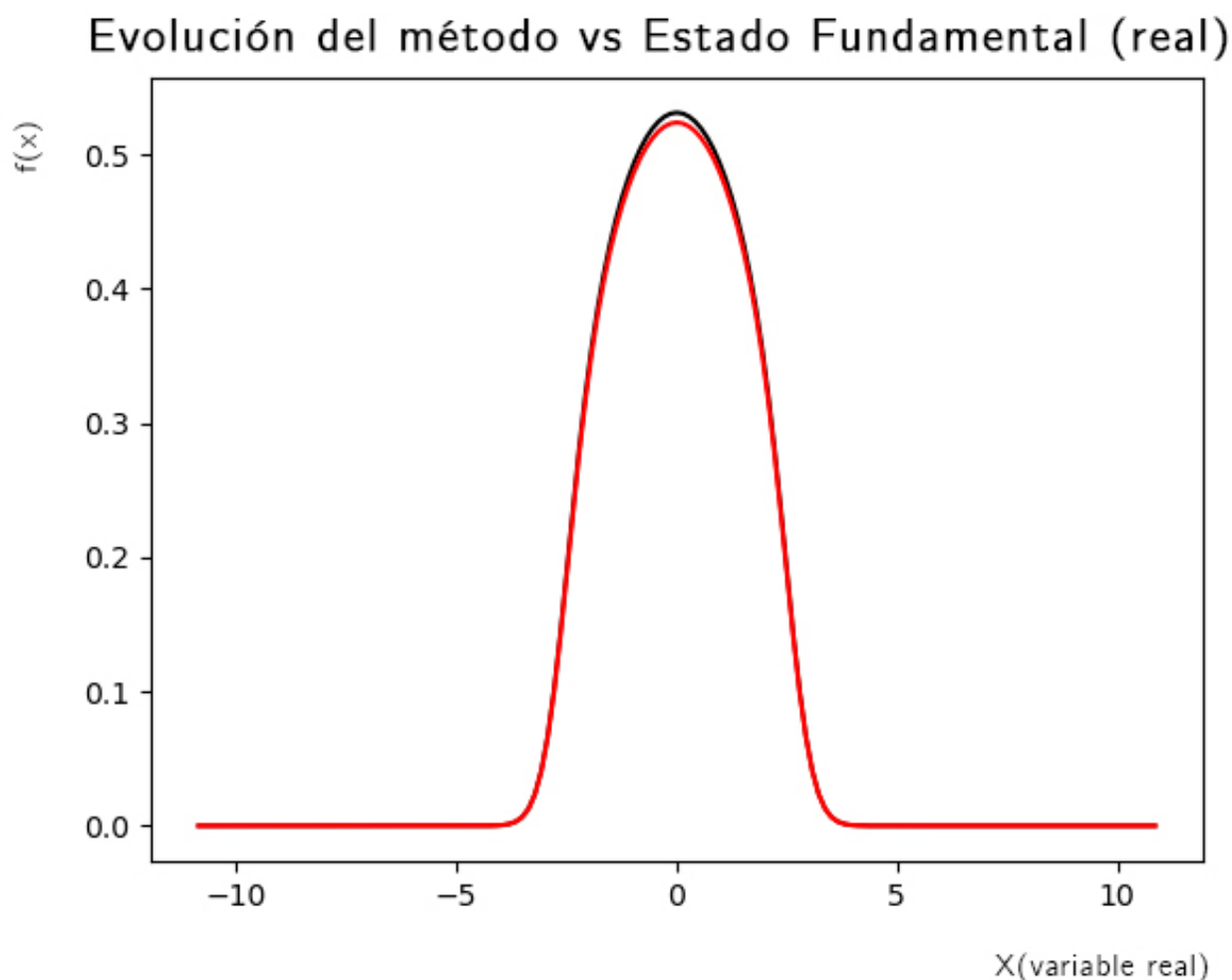
El valor de Hamiltoniano que se obtiene en este mínimo, restringido al subespacio de funciones impares es 5.079230208781636, mientras que el mínimo de Hamiltoniano que se obtuvo con dato inicial mixto (combinación de pares e impares) es de 4.301357412921119, coherentemente con lo que mencionábamos.

### 7.1.2. Testeo directo del Método para la GPE

Hechas éstas corridas que coinciden con lo que esperábamos desde la teoría y razonablemente satisfechos entonces con la bondad del estado fundamental que obtuvimos con el dato inicial de paridad mixta, procedimos a usarlo como dato inicial de nuestro método de cuarto orden, el objeto de ésta publicación. Recordemos que nuestra búsqueda de este estado fundamental respondía a que lo queremos usar para probar el método de resolución de nuestra ecuación. Esto es porque, por definición, al aplicarse la ecuación pensada como un funcional (la GPE) no sufre modificaciones, como se mencionó, teóricamente solo rota en el plano complejo. Por supuesto, no esperamos observar exactamente eso. Sucede por un lado que el que estamos usando como estado fundamental en realidad es una aproximación y, por otro, que en nuestro método de cuarto orden, por ser como ya se explicó

un método de Splitting, ni siquiera estamos evolucionando temporalmente con la ecuación completa sino, justamente, de a partes y el estado fundamental (que es estado fundamental de la ecuación entera), incluso si fuera el teórico, no debería ser invariante temporalmente ante una de las dos por separado.

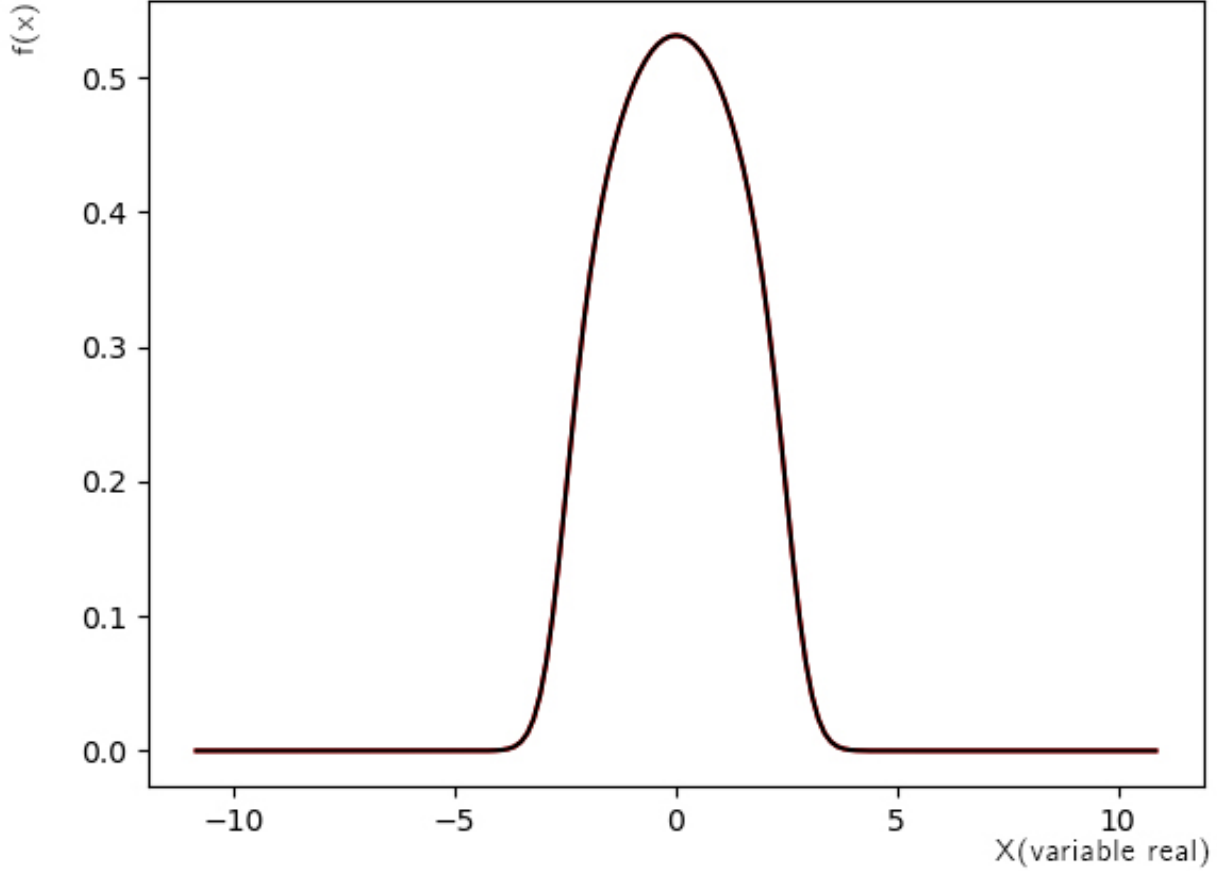
Con éstas esperables fuentes de error y modificación en mente, graficamos ambos, nuestro estado fundamental aproximado y su evolución temporal. Observamos efectivamente unas diferencias, aunque bastante sutiles en módulo y en parte real. Se pueden ver en los gráficos a continuación, primero ambas partes reales, luego las imaginarias y finalmente ambos módulos (en negro el estado fundamental, dato inicial de la corrida para el método de cuarto orden). En módulo son, afortunadamente, tan parecidas que a una escala razonable se superponen ambos gráficos:



## Evolución del método vs Estado Fundamental (imag)



## Evolución del método vs Estado Fundamental (abs)



Nótese que nuestra aproximación del estado fundamental tiene parte imaginaria igual a cero pero, naturalmente, el método se corre y genera una solución con parte imaginaria no nula, ahí está, quizás, la principal diferencia, ya que como vemos la parte real y sobre todo el módulo son similares.

### 7.1.3. Testeo a través del Multiplicador de Lagrange

Algo que nos interesó profundizar es el hecho de que, como se dijo, éstos puntos críticos que encuentra el algoritmo de minimización para buscar el estado fundamental son puntos de Lagrange. Por lo tanto, por definición, evaluados en la derivada del Hamiltoniano, tiene que dar la misma función multiplicada por un escalar. Ese escalar es justamente el Multiplicador de Lagrange. Sabiendo que el estado fundamental, como ya se dijo, al evolucionar temporalmente con la GPE sólo puede sufrir rotaciones (multiplicación por un complejo de módulo uno), podemos definir la función

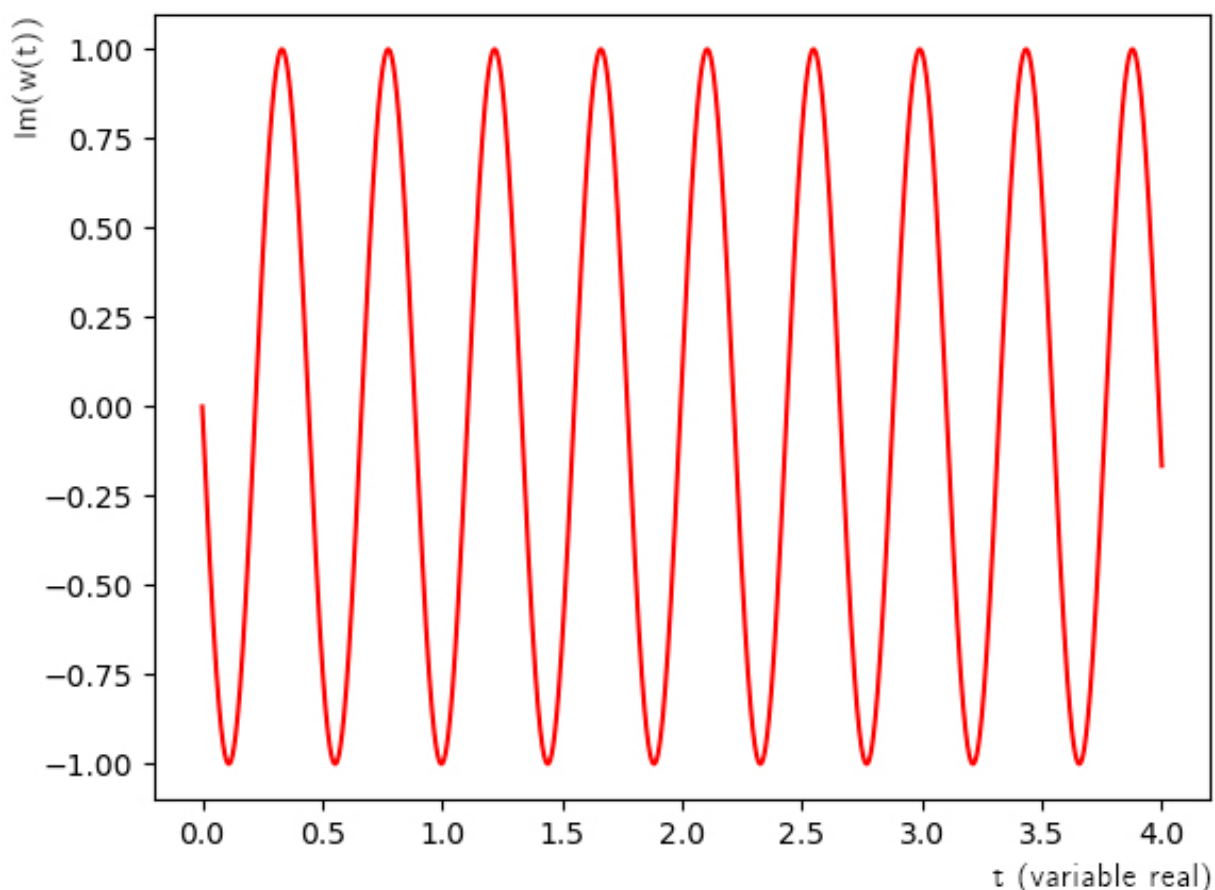
$$\omega(t) = \langle \psi_0(z); \psi(z, t) \rangle \quad (7.3)$$

y resultaría, desarmando la rotación en parte real e imaginaria

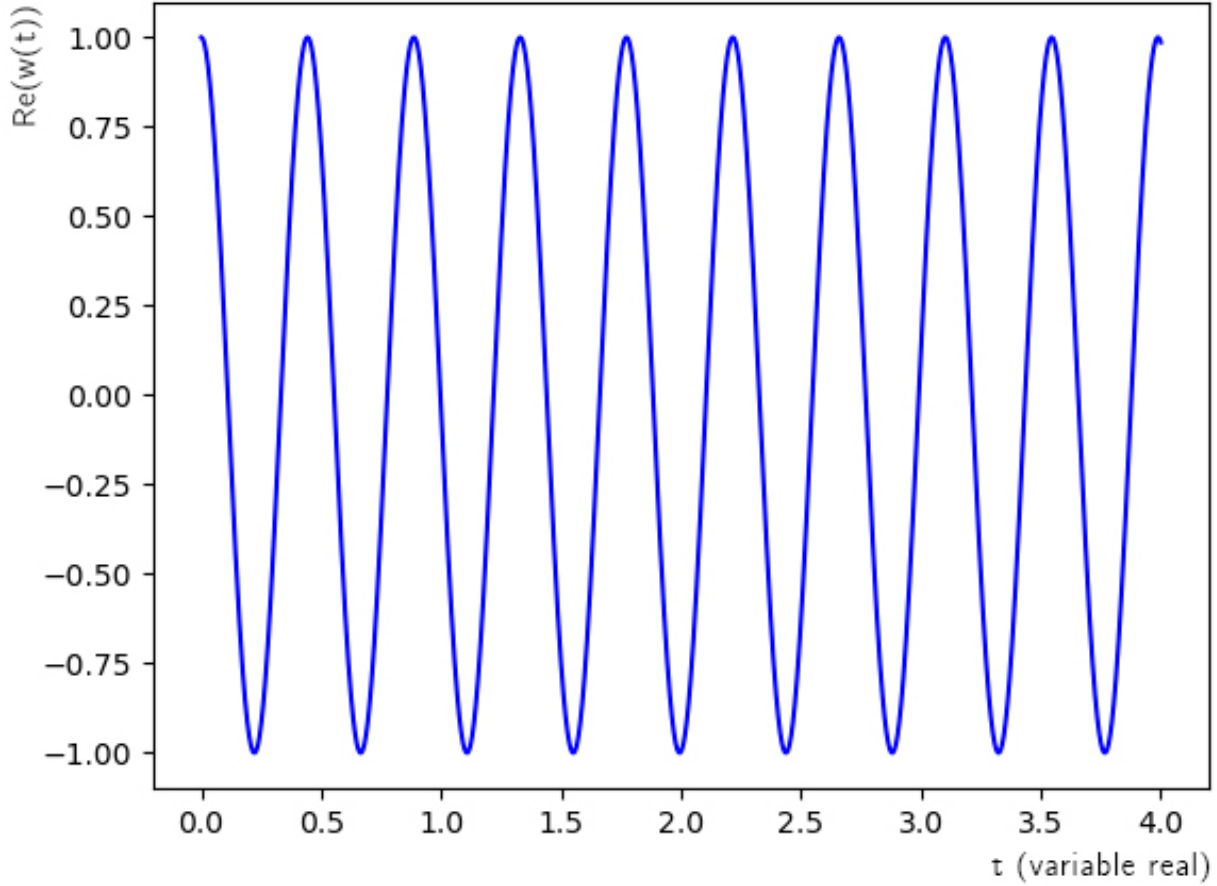
$$\omega(t) = \cos(\lambda t) \langle \psi_0(z); \psi_0(z) \rangle - i \sin(\lambda t) \langle \psi_0(z); \psi_0(z) \rangle = \cos(\lambda t) - i \sin(\lambda t) \quad (7.4)$$

A partir de ésto, pensamos que si podíamos aproximar numéricamente  $\omega$ , es decir aproximar con cuadratura la integral implicada en el producto interno que la define, tomándole parte real y parte imaginaria deberíamos ver sinusoides con ese  $\lambda$ , ese multiplicador, como velocidad angular (la parte real un coseno, la parte imaginaria un seno). Efectivamente, aproximando esa integral como producto de un vector conjugado por el otro sin conjugar y multiplicados por los pesos (es decir la cuadratura usual que usamos en este trabajo) obtenemos los siguientes gráficos para sendas partes, confirmando el caracter perfectamente sinusoidal. El primero es la parte imaginaria con el menos adelante, tal como sale de la cuenta, y el segundo es la parte real:

### Parte imaginaria de Omega



## Parte real de Omega



Por otro lado, para seguir analizando, ese Multiplicador  $\lambda$  también puede ser obtenido de otra forma. Pensando que, si las funciones que encontramos en la búsqueda del estado fundamental son puntos críticos que salen del método de Lagrange, notando que la GPE es justamente la derivada de ese Hamiltoniano tal como lo escribimos arriba (la cuenta es inmediata), las funciones-puntos críticos son autofunciones de la GPE (porque debe cumplirse la mencionada ecuación de Multiplicadores de Lagrange). Dicho de otra manera, el estado fundamental, evaluado en la ecuación tiene que dar un múltiplo de sí mismo, siendo ese número que multiplica el Multiplicador. Matemáticamente decimos que:

$$-\frac{1}{2}\psi_0'' + \frac{\gamma^2}{2}z^2\psi_0(z) + \beta|\psi_0(z)|^2\psi_0(z) = \lambda\psi_0(z) \quad (7.5)$$

Y, por lo tanto

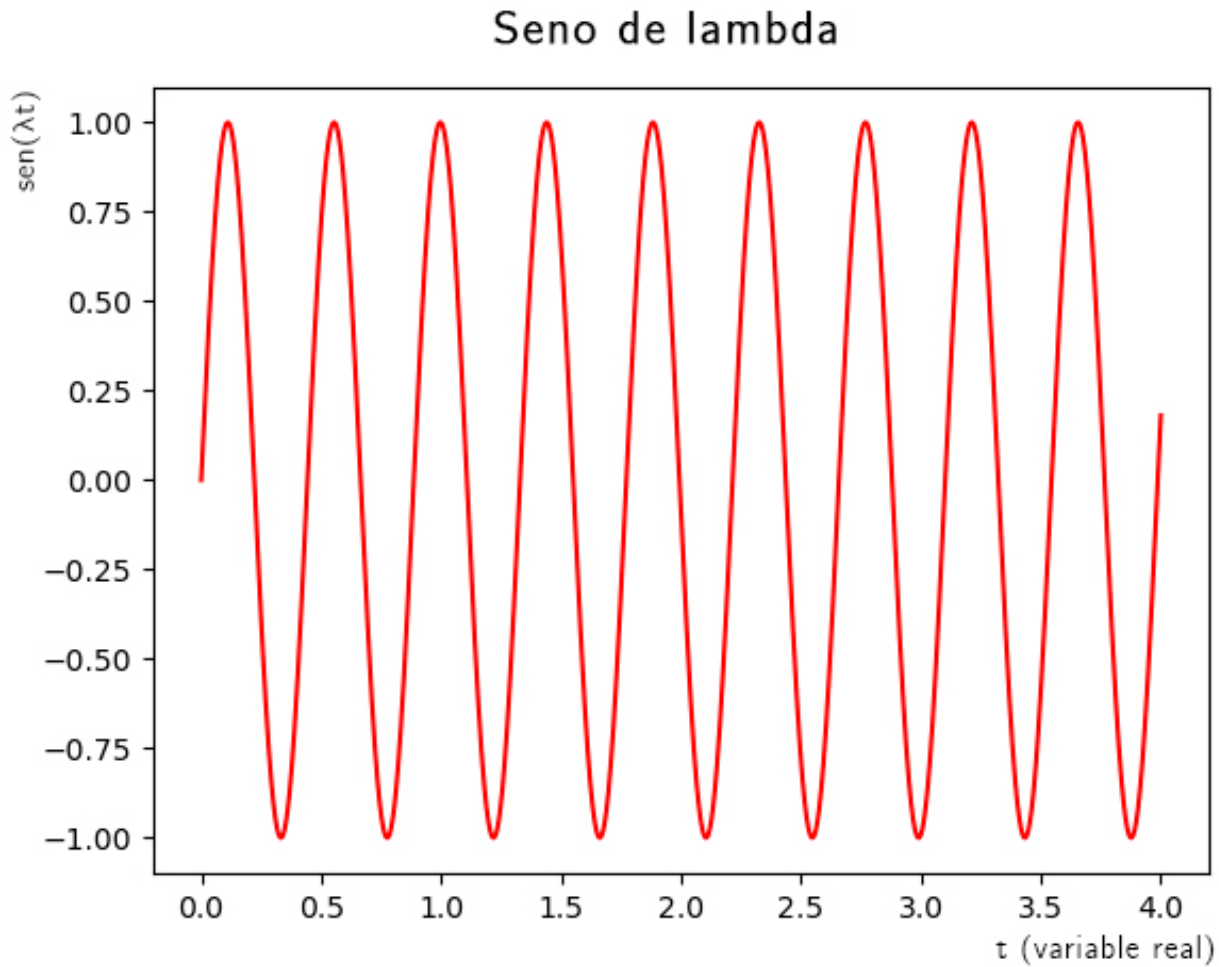
$$\langle \psi_0(z); -\frac{1}{2}\psi_0''(z) + \frac{\gamma^2}{2}z^2\psi_0(z) + \beta|\psi_0(z)|^2\psi_0(z) \rangle = \lambda \langle \psi_0(z); \psi_0(z) \rangle = \lambda \quad (7.6)$$

Entonces, estimar ese producto interno (nuevamente con cuadraturas), debería darnos un valor estimado para ese Multiplicador  $\lambda$ . Más aún, usando ese  $\lambda$  que obtengamos como velocidad angular

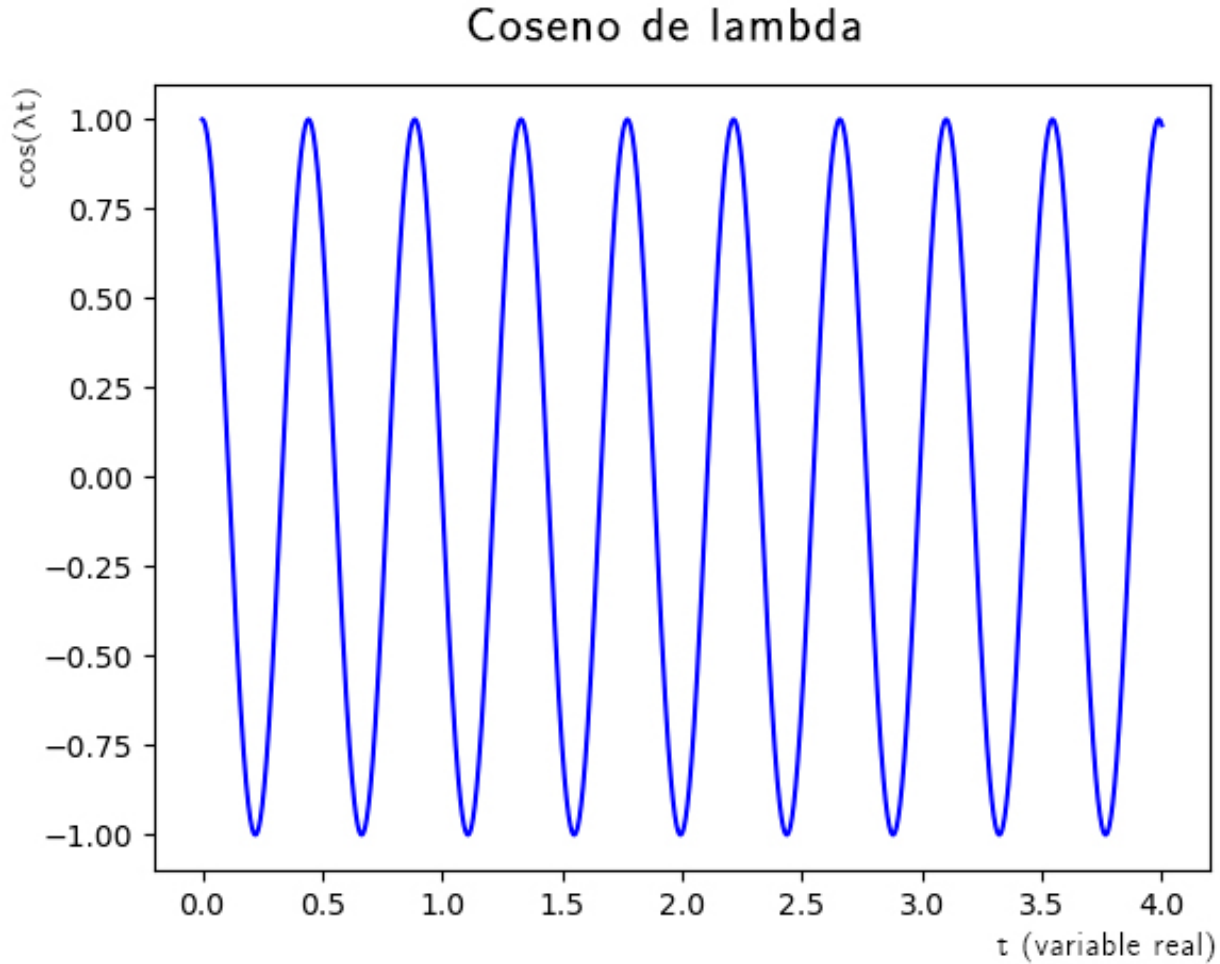
de un coseno y un seno esperamos obtener un gráfico parecido a los dos obtenidos arriba (por ser el mismo  $\lambda$  al menos en la teoría). Esa cuenta es muy similar a nuestra aproximación numérica del Hamiltoniano tal como lo definimos, pues el lado izquierdo si se desarrolla queda (usando integración por partes en el primer término):

$$\frac{1}{2}\langle\psi'_0(z);\psi'_0(z)\rangle + \frac{\gamma^2}{2}\langle\psi'_0(z);z^2\psi_0(z)\rangle + \beta\langle\psi_0^2(z);\psi_0^2(z)\rangle = \lambda \quad (7.7)$$

Eso hicimos y obtuvimos entonces un  $\lambda$  aproximado estimando ese producto. A continuación graficamos  $\text{sen}(\lambda t)$  y también  $\text{cos}(\lambda t)$

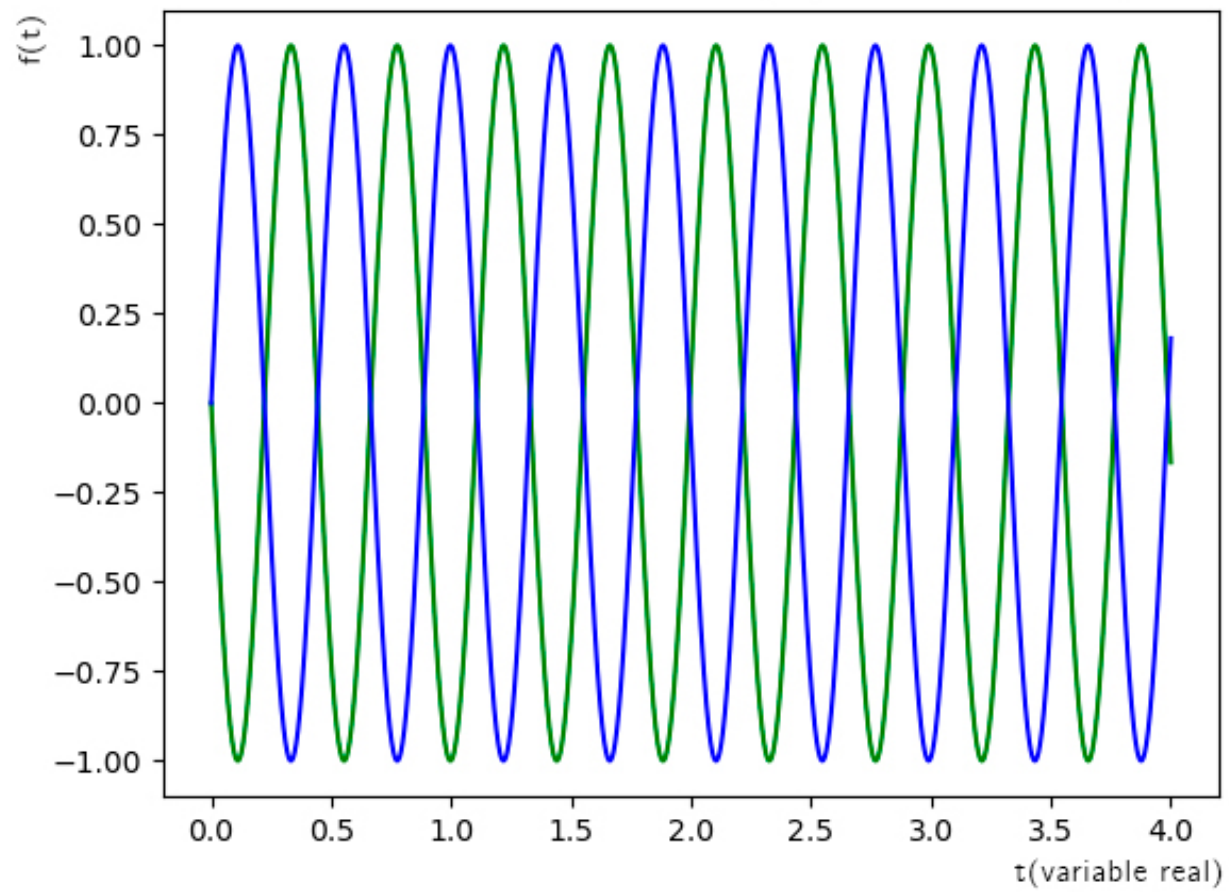




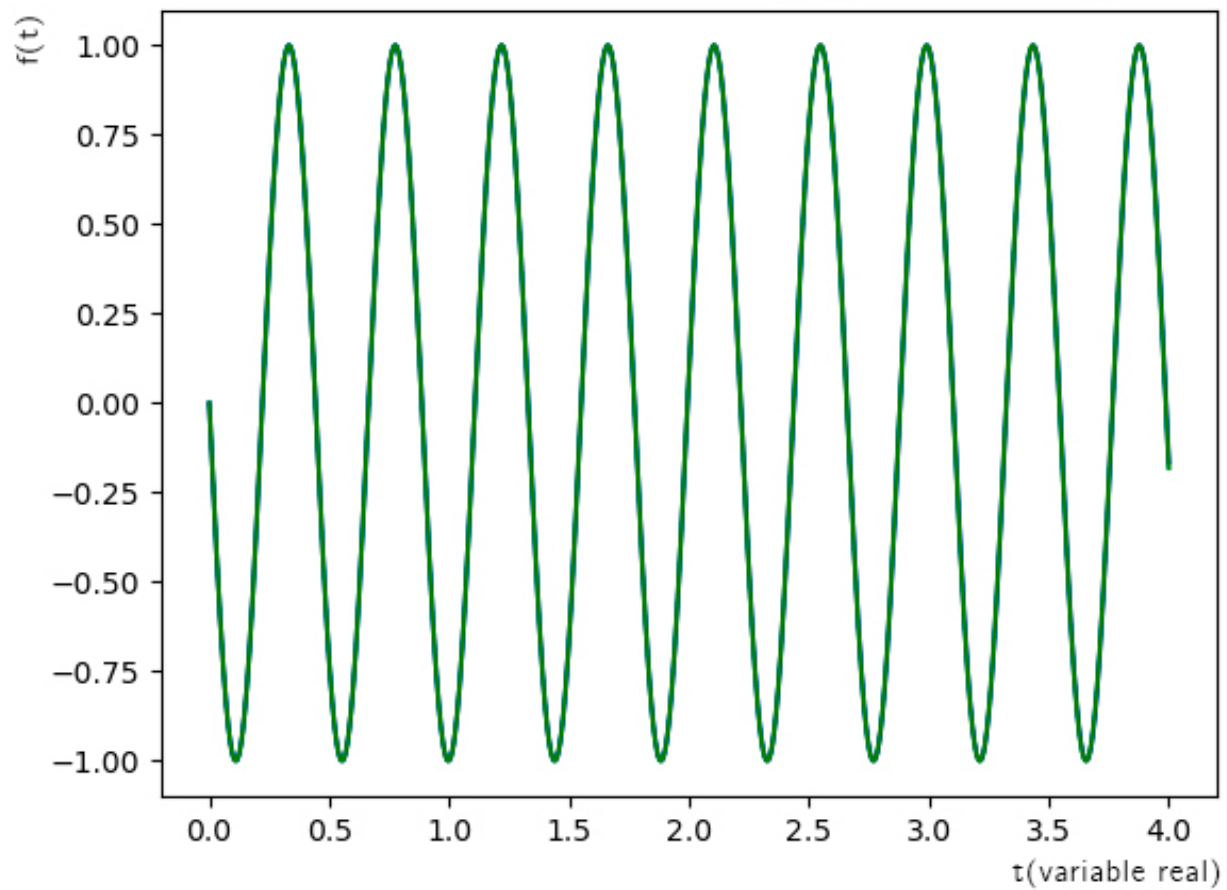


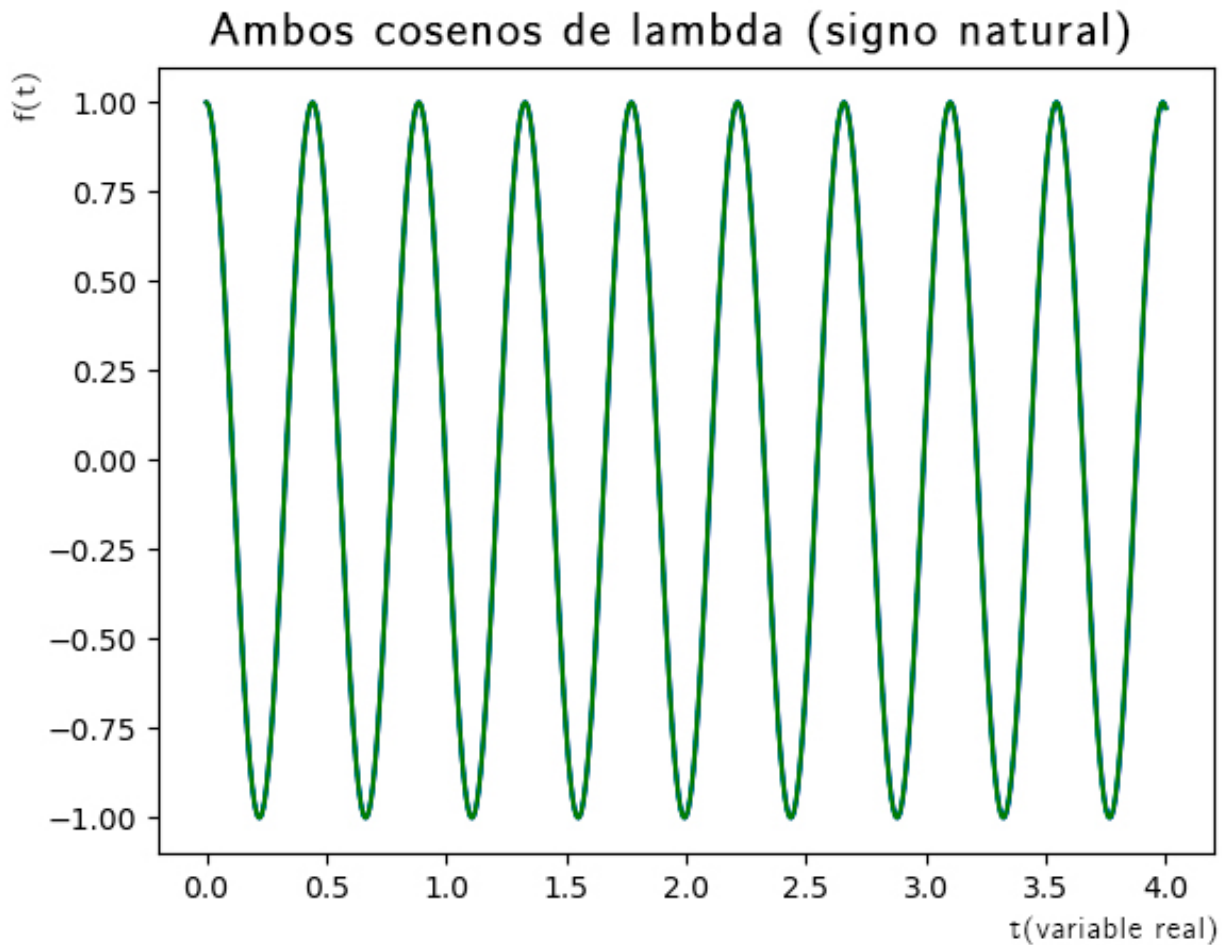
Para comparar entonces los sinusoides obtenidos de las dos formas distintas los graficamos juntos, con la intención de ver si efectivamente lo que debía coincidir teóricamente lo hacía de forma numérica también. Graficamos primero el  $-\text{sen}(\lambda t)$  que obtuvimos con el primer razonamiento y el  $\text{sen}(\lambda t)$  que obtuvimos tal como contamos arriba, para que no se superpongan de entrada y se pueda ver claramente que están espejados, cosa que uno esperaría si fueran la misma función cambiada de signo. Luego sí, graficamos ambos  $-\text{sen}(\lambda t)$  y  $\text{cos}(\lambda t)$  en un mismo gráfico:

Ambos senos de lambda (signo cambiado)



Ambos senos de lambda (signo natural)





Nótese que los gráficos se superponen perfectamente. Es decir, nuestra aproximación numérica del Multiplicador  $\lambda$  es buena: de ambas formas obtenemos los mismos sinusoides, ya sea obteniéndolos a partir de la función  $\omega$  (que es básicamente una medida de cómo rota el estado fundamental con el paso del tiempo) o a partir de obtenerlos evaluando el  $\lambda$  que sale de la ecuación de puntos críticos de Lagrange (que el estado fundamental cumple).

Satisfechos entonces con la buena concordancia entre teoría y aplicación de nuestros métodos numéricos, damos por concluida esta sección, habiendo obtenido entonces buenos resultados.

## Parte VI

# Conclusiones

### 8. Conclusiones

En éste trabajo abordamos una notable ecuación diferencial en derivadas parciales, primero de forma teórica y luego en su implementación numérica. Nos dedicamos a estudiar la propuesta de resolverla mediante un método de descomposición temporal, lo que nos llevó primero a resolver separadamente dos subproblemas derivados, uno de forma analítica y el otro con descomposición espectral en funciones de Hermite. Luego, debimos componer esas subsoluciones para obtener la solución general. Éstos pasos sucesivos relatan el desarrollo teórico que hicimos pero, también el orden en que fue pensada y hecha la implementación computacional.

Como expusimos, los resultados numéricos son satisfactorios. La forma en que nuestro operador evoluciona se acerca bastante a la que esperaríamos obtener mediante el verdadero operador. Vale resaltar también, a juzgar por los resultados obtenidos con el parámetro  $\lambda$  (el multiplicador de Lagrange), que nuestras cuadraturas numéricas funcionan correctamente, porque todos los productos escalares que debían dar resultados iguales en la teoría, nos lo daban.

Concluimos que, por lo que pudimos ver en esta aplicación, el método funciona, es estable y converge correctamente. Su, quizás única, contra es una que en un problema de las dimensiones que implementamos no afecta, pero para problemas más grandes podría hacerlo. El lector avezado puede haber ya advertido: a diferencia del caso de Fourier, no hay una "Transformada Rápida de Hermite". Eso hace que ésta forma de resolución no sea eficiente para problemas grandes. Sin embargo, por lo dicho, para problemas no muy grandes, es cómoda y tiene probadas ventajas.

## Referencias

- [1] T. Cazenave, A. Haraux, '*An introduction to Semilinear Evolution Equations*', Clarendon Press-Oxford(1998) - Capítulo 7.
- [2] Ludwig Gauckler, '*Convergence of a split-step Hermite method for the Gross-Pitaevskii equation*', IMA Journal of Numerical Analysis (2011).
- [3] Jongwoo Lee, Bengt Fornberg '*A split step approach for the 3-D Maxwell's equations*', Journal of Computational and Applied Mathematics (2003).
- [4] Haruo Yoshida '*Construction of higher order symplectic integrators*', National Astronomical Observatory (1990).
- [5] Mariano de Leo et al., '*High-order time-splitting methods for irreversible equations*', IMA Journal of Numerical Analysis Advance Access (2003).
- [6] Weizhu Bao '*A fourth-order time-splitting Laguerre-Hermite pseudo-spectral method for Bose-Einstein condensates*', SIAM Journal on Scientific Computing, 26 (2005),
- [7] Weizhu Bao y Q. Du '*Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow*', SIAM Journal on Scientific Computing, 26 (2005),