

Condiciones de frontera absorbentes para la ecuación de Schrödinger no lineal discretizada con elementos finitos

I. ALONSO MALLO¹, N. REGUERA²

¹ *Dpto. de Matemática Aplicada, Universidad de Valladolid, Facultad de Ciencias, Prado de la Magdalena s.n., Valladolid. E-mail: isaias@mac.uva.es.*

² *Dpto. de Matemáticas y Computación, Universidad de Burgos, Escuela Politécnica Superior, Campus río Vena, Avda. Cantabria s.n, Burgos. E-mail: nreguera@ubu.es.*

Palabras clave: condiciones de frontera absorbentes, ecuación no lineal de Schrödinger

Resumen

En este trabajo se integra la ecuación no lineal de Schrödinger junto con condiciones de frontera absorbentes. Se han considerado elementos finitos lineales para la discretización espacial y se han acoplado, de manera adaptativa, las condiciones de frontera absorbentes construidas para una discretización análoga de la ecuación lineal de Schrödinger.

1. Introducción

Son numerosas las situaciones que nos llevan a resolver numéricamente un problema de evolución de ecuaciones en derivadas parciales definido en un dominio infinito. Para ello, es necesario restringir el problema a un subdominio acotado e imponer condiciones de frontera artificiales. Si la solución de este nuevo problema coincide con la restricción de la solución del problema original, las condiciones de frontera se llaman transparentes (CFT). Sin embargo, aunque estas condiciones de frontera evitan la existencia de reflejos cuando la solución llega a la frontera, suelen ser no locales y en la práctica, muchas veces se prefiere utilizar condiciones de frontera locales absorbentes (CFA). Estas condiciones de frontera se construyen como aproximación de las CFT y permiten pequeños reflejos de la solución. En la literatura existente en este campo, cabe destacar el trabajo pionero de Engquist y Majda [6] para la ecuación de ondas. También se han obtenido CFA para otras muchas ecuaciones, como la ecuación lineal de Schrödinger [1, 2, 3, 4, 7],

$$\partial_t u(x, t) = \frac{-i}{c} (\partial_{xx} u(x, t) + V u(x, t)), \quad (1)$$

donde c y V son constantes reales. En [1, 2, 3, 7] se utilizan diferencias finitas para la discretización espacial de la ecuación. Es más, en [2, 3] las CFA son específicas de dicha discretización espacial. Por el contrario, en [4] se construyen CFA para una discretización en espacio mediante elementos finitos lineales. Como se analiza en este trabajo, estas CFA tienen la ventaja de que se pueden acoplar a una discretización mediante elementos finitos de mayor orden en el dominio interior.

En este trabajo consideramos la ecuación no lineal de Schrödinger

$$\partial_t u(x, t) = i(\partial_{xx} u(x, t) + \nu |u(x, t)|^2 u(x, t)), \quad (2)$$

donde ν es una constante real. Para esta ecuación existen menos trabajos sobre CFA en la literatura. Una opción, seguida en [5] y [10] es utilizar para (2) las CFA obtenidas para la ecuación lineal de Schrödinger. Sin embargo, los resultados mostrados en [10] no son muy optimistas. Una alternativa distinta es la considerada en [8], entre otros, incluyendo en la ecuación un potencial absorbente. Sin embargo, esta técnica tiene inconvenientes pues se realiza un cambio artificial en la ecuación original que se quiere integrar.

En este trabajo integramos la ecuación no lineal de Schrödinger (2) utilizando elementos finitos lineales para la discretización espacial y acoplamos de manera adaptativa las CFA obtenidas en [4] para la ecuación lineal. Además, la implementación de las CFA es también adaptativa (de forma similar a como se propuso en [3] para el caso lineal). De esta manera, las CFA van cambiando en cada paso en tiempo teniendo en cuenta la solución numérica que llega en ese instante de tiempo a la frontera. Los resultados numéricos son satisfactorios, obteniéndose resultados de absorción.

2. Discretización de la ecuación y condiciones de frontera absorbentes

En primer lugar vamos a considerar la discretización espacial de la ecuación (2) mediante elementos finitos lineales. Para ello, sea $h = (x_r - x_l)/N > 0$, y denotemos por $x^j = x_l + jh$, $j = 0, \dots, N$ los nodos de una red del intervalo $[x_l, x_r]$, en el cual queremos integrar la ecuación. Denotemos por ρ_i las funciones de forma y sea

$$u_h(t) = \sum_{i=1}^N u^i(t) \rho_i.$$

La discretización espacial que vamos a considerar en el dominio interior $[x_l, x_r]$ es por tanto

$$\frac{1}{6} \left(\frac{d}{dt} u^{j-1} + 4 \frac{d}{dt} u^j + \frac{d}{dt} u^{j+1} \right) = \frac{i}{h^2} (u^{j-1} - 2u^j + u^{j+1}) + \varphi_j(u_h), \quad (3)$$

para $j = 1, \dots, N-1$, donde $\varphi_j(u_h)$ hace referencia al término no lineal.

Como ya hemos comentado anteriormente, vamos a acoplar a esta discretización de la ecuación no lineal (2), las CFA construidas para una discretización similar de la ecuación lineal de Schrödinger. Estas CFA vienen dadas por

$$\delta_0 u^1 + \delta_1 \frac{d}{dt} u^1 = \delta_2 u^0 + \delta_3 v^0 + \delta_4 \frac{d}{dt} v^0, \quad (4)$$

para la frontera izquierda, y

$$\delta_0 u^{N-1} + \delta_1 \frac{d}{dt} u^{N-1} = \delta_2 u^N + \delta_3 v^N + \delta_4 \frac{d}{dt} v^N, \quad (5)$$

para la frontera derecha. Hemos utilizado la notación

$$\frac{d}{dt} u^0 = v^0 \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt} u^N = v^N. \quad (7)$$

Los coeficientes δ_j de estas CFA dependen de ciertos nodos de interpolación (véase [4] para más detalles) y del potencial V de la ecuación lineal (1). Puesto que ahora vamos a utilizar estas CFA para el caso no lineal (2), en cada paso en tiempo vamos a elegir $V = \nu|u^J|^2$, para un número natural J fijo, próximo a N . En cuanto a los nodos de interpolación, al igual que se hace en [3] para el caso lineal, van a ser elegidos de manera adaptativa en cada paso en tiempo.

La discretización en espacio (3) junto con (6), (7) y las CFA (4) y (5) nos lleva a plantear un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{aligned} R \frac{d}{dt} \mathbf{u}(t) &= M \mathbf{u}(t) + \phi(\mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_0 \end{aligned} \quad (8)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) &= [v^0(t), u^0(t), u^1(t), \dots, u^N(t), v^N(t)]^T, \\ \mathbf{u}_0 &= [0, u_0^0, u_0^1, \dots, u_0^N, 0]^T. \end{aligned}$$

Para integrar numéricamente (8) hemos considerado la regla del punto medio implícita, siguiendo las indicaciones de [9] para su implementación y obteniendo así

$$R \mathbf{G}_n = \frac{k}{2} (M(\mathbf{u}_n + \mathbf{G}_n) + \phi(\mathbf{u}_n + \mathbf{G}_n)) \quad (9)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + 2\mathbf{G}_n \quad (10)$$

La resolución numérica del sistema de ecuaciones no lineales (9) se ha realizado con el siguiente método iterativo:

$$\left(R - \frac{k}{2}M\right)\mathbf{G}_n^{i+1} = \frac{k}{2} \left(M\mathbf{u}_n + \phi(\mathbf{u}_n + \mathbf{G}_n^i)\right).$$

3. Experimentos numéricos

Veamos por último los resultados numéricos que obtenemos con el algoritmo propuesto en la sección anterior. Tomaremos como condición inicial

$$u_0(x) = \sqrt{2} \exp(i5x/2) \operatorname{sech}(x), \quad x \in [-35, 35].$$

Nótese que el dominio computacional $[-35, 35]$ se ha elegido suficientemente grande para que contenga el soporte de la condición inicial. Hemos representado en las Figuras 1 y 2

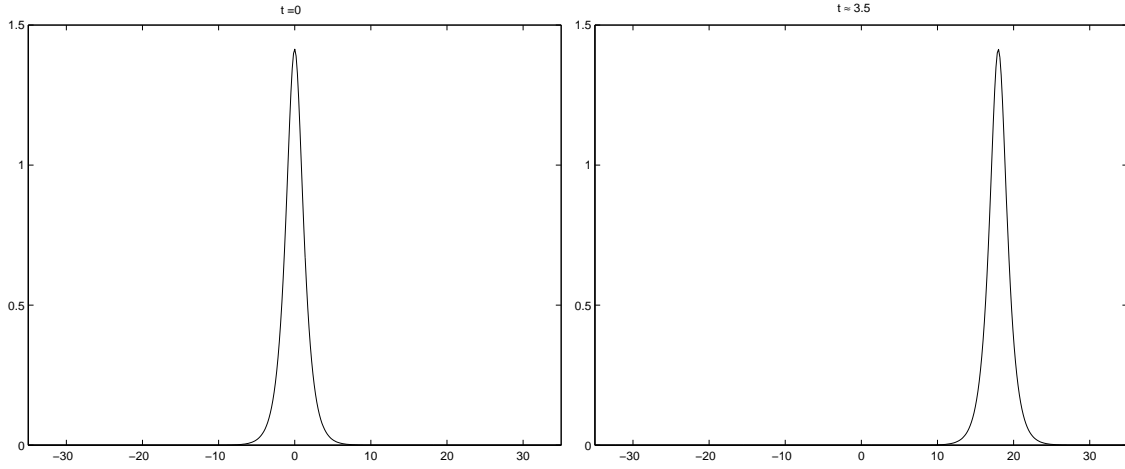


Figura 1: Módulo de la solución numérica para $t = 0$ y $t \approx 3,5$

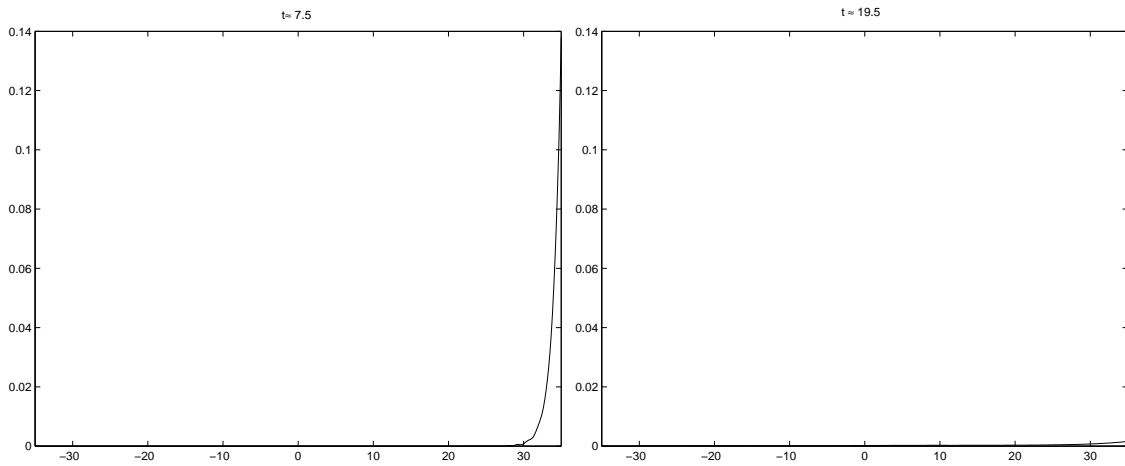


Figura 2: Módulo de la solución numérica para $t \approx 7,5$ y $t \approx 19,5$

el módulo de la solución numérica en cuatro instantes de tiempo distintos. Vemos cómo la solución viaja hacia la derecha con una velocidad aproximadamente 5 y es absorbida por las CFA al llegar a la frontera. El experimento numérico es por tanto satisfactorio, consiguiendo una buena absorción de la solución en la frontera. Nótese además que estos buenos resultados de absorción son obtenidos sin utilizar información a priori de la solución, gracias a la técnica adaptativa utilizada.

Agradecimientos

Este trabajo está parcialmente subvencionado por MCYT mediante el proyecto MTM 2004-08012 cofinanciado con fondos FEDER.

Referencias

- [1] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *Weak ill-posedness of spatial discretizations of absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations*, SIAM J. Numer. Anal., V40, N1, (2002), 134–158.
- [2] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *Discrete absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. Construction and error analysis*, SIAM J. Numer. Anal., V41, N5, (2003), 1824–1850.
- [3] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *Discrete absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. Practical implementation*, Math. Comput., V73, N245, (2004), 127–142.
- [4] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, *A high order finite element discretization with local absorbing boundary conditions of the linear Schrödinger equation*, J. Comput. Physics, V220, N1, (2006), 409–421.
- [5] C.-H. Bruneau, L. Di Menza, T. Lehner, *Numerical resolution of some nonlinear Schrödinger-like equations in plasmas*, Numer. Methods Partial Diff. Equations, V15, (1999), 672–696.
- [6] B. Engquist, A. Majda, *Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves*, Math. Comput., V31, (1977), 629–651.
- [7] T. Fevens, H. Jiang, *Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation*, SIAM J. Sci. Comput., V21, (1999), 255–282.
- [8] F. If, P. Berg, P.L. Christiansen, O. Skovgaard, *Split-step spectral method for nonlinear Schrödinger equation with absorbing boundaries*, J. Comput. Phys., V72, (1987), 501–503.
- [9] J.M. SANZ-SERNA, M.P. CALVO, *Numerical Hamiltonian problems*, Chapman & Hall, London 1994.
- [10] J. Szeftel, *Design of absorbing boundary conditions for Schrödinger equations in R^d* , SIAM J. Numer. Anal., V42, N4, (2004), 1527-1551.