



UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SARMIENTO
DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA

*Evaluado y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU).
Resolución N° 1178/11. Calificación "B".*

**Métodos numéricos eficientes basados en descomposición de
operadores para la solución de ecuaciones de evolución**

Trabajo de tesis para optar por el título de Doctor en Ciencia y Tecnología
de la Universidad Nacional de General Sarmiento

Autor: Lisandro Aníbal Raviola

Director: Dr. Mariano Fernando De Leo

20 de diciembre de 2023

Resumen

En esta tesis implementamos métodos numéricos para la solución eficiente de ecuaciones de evolución en derivadas parciales y los aplicamos al estudio de modelos matemáticos surgidos en distintos problemas de ciencia y tecnología. En particular, investigamos métodos basados en técnicas de *descomposición de operadores (splitting)*, caracterizados por una virtuosa conjunción de simplicidad conceptual y versatilidad que permite adaptarlos a las particularidades de los operadores involucrados en diversos problemas. En este contexto, evaluamos el desempeño de esquemas aditivos de descomposición de operadores de alto orden recientemente introducidos, que denominamos *métodos afines*. Estos métodos se obtienen por extrapolación y consisten en combinaciones afines de propagadores de Lie–Trotter. Debido a su estructura, permiten abordar de manera indistinta problemas de evolución tanto reversibles como irreversibles.

Con el objetivo de ponderar las cualidades de los esquemas numéricos propuestos, comparamos su rendimiento con respecto al de integradores geométricos simplécticos basados en descomposiciones multiplicativas ampliamente utilizados en la literatura. Verificamos la eficacia de los métodos introducidos aplicándolos a la solución numérica de ecuaciones no lineales de tipo Schrödinger y Ginzburg–Landau, modelos paradigmáticos en Física y otras disciplinas con aplicaciones en óptica no lineal, hidrodinámica, mecánica estadística cuántica y ondas en plasmas, incluyendo en nuestro estudio variantes no locales de dichas ecuaciones que involucran operadores fraccionarios. De este modo, analizamos el comportamiento de los métodos investigados tanto en situaciones donde la dinámica es reversible y posee cantidades conservadas, como en problemas disipativos e irreversibles en los cuales los esquemas simplécticos de alto orden pueden resultar numéricamente inestables por requerir pasos de integración negativos. Mostramos que los métodos afines aproximan las soluciones de los modelos estudiados de manera exacta, estable y eficiente, con un costo computacional equivalente al de los métodos de descomposición multiplicativos habitualmente utilizados. Adicionalmente, damos evidencia de que los métodos afines de alto orden logran conservar invariantes de manera similar a los esquemas multiplicativos dentro de las limitaciones de la aritmética de doble precisión de las computadoras usuales.

Complementariamente, los métodos afines admiten de manera directa y sistemática diversas generalizaciones y optimizaciones, como adaptatividad temporal, procesamiento paralelo y descomposiciones de más de dos operadores, cuya realización mediante esquemas multiplicativos no es viable o demanda una sofisticada y engorrosa búsqueda en el espacio de coeficientes posibles. Como ejemplo de la viabilidad de estas optimizaciones, incorporamos algoritmos de adaptatividad temporal a los esquemas propuestos y evaluamos su impacto en la eficiencia y estabilidad de los mismos, contrastando su desempeño con el de esquemas multiplicativos adaptativos que constituyen el estado del arte en la materia. Los resultados obtenidos confirman que nuestra generalización de los métodos afines proporciona un rendimiento superior. En su conjunto, el trabajo realizado permite concluir que los métodos afines de alto orden resultan eficientes y de aplicación general, con interesantes propiedades y potencialidades que ameritan ulteriores investigaciones.

Como parte de nuestra labor, desarrollamos un prototipo funcional de una biblioteca de *software* de código abierto. Además de operar como banco de prueba de los métodos evaluados en esta investigación y de establecer un punto de partida para futuras extensiones, esta herramienta proporciona un laboratorio de experimentación numérica accesible a usuarios finales interesados en el estudio de otros métodos y modelos particulares.

Palabras clave: ecuaciones de evolución, métodos numéricos, descomposición de operadores, ecuación de Schrödinger no lineal, ecuación compleja de Ginzburg–Landau, Laplaciano fraccionario, métodos afines, integración geométrica, métodos simplécticos, aproximación de Lie–Trotter, adaptatividad temporal, solitones, métodos pseudoespectrales



Métodos numéricos eficientes basados en descomposición de operadores para la solución de ecuaciones de evolución © 2024 by Lisandro Aníbal Raviola is licensed under Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International. . To view a copy of this license, visit <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Agradecimientos

Al director de esta tesis, devenido en amigo y referente, Dr. Mariano Fernando De Leo, por la sabiduría, la calidez y calidad humanas, la confianza, la generosidad y el estímulo permanente.

A mis padres Rita y Raúl, y a mis hermanos Mariu y Luciano, por el cariño y el apoyo incondicional desde el inicio de los tiempos.

A Yazmín, por todo el amor del mundo y por ser mi mejor compañera. Sin su presencia constante esta tesis no existiría, como tantas otras cosas más importantes y hermosas.

A mis hijas Giulia y Maia, por el amor y por hacerme pensar en cómo hacer el mundo que quiero para ellas.

A mis amigos de toda la vida: Georgina, Damián, Agustina, Adrián, Lia, Jorge, Hugo, Valeria, por el afecto, el aguante, el buen humor y todo lo que me enseñaron.

A mis amigos del exilio porteño/bonaerense: Juan, Gustavo, Maxi, Melina, Lucía, Leandro, Mariana, por los buenos momentos y por acompañarme en etapas difíciles con infinita paciencia y generosidad.

A mis compañeros de la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura de la UNR, con quienes me reencontré recientemente para compartir un ámbito receptivo y estimulante.

A las autoridades de la Escuela de Formación Básica de la FCEIA-UNR, en particular a la Lic. Gloria Colombo, por apoyar en términos muy concretos la finalización de esta tesis.

A los compañeros y amigos de Hackfun y Cybercirujas, con quienes luchamos contra la obsolescencia programada y los oligarcas del dato, y a favor de la soberanía tecnológica y el cómputo popular.

A la Educación Pública Argentina, y a los que la hicieron y la hacemos posible.

A la comunidad universal de Software Libre y a su extrapolación, la Cultura Libre (y Comunitaria): no hay libertad sin comunidad ni solidaridad.

A Sci-Hub, Library Genesis, Z-Library, Nexus y annas-archive.org.

A la utopía de la Patria Justa, Libre y Soberana que siempre alumbra el camino.

Índice general

1. Introducción	9
1.1. Motivación y contexto	9
1.2. Comunicaciones y publicaciones relacionadas	13
1.3. Organización de la tesis	14
I Modelos y métodos	17
2. Modelos	21
2.1. Problema general	21
2.2. Modelos conservativos: ecuaciones tipo Schrödinger	22
2.3. Modelos disipativos: ecuaciones complejas de Ginzburg-Landau	27
2.4. Modelos no locales: variantes fraccionarias	29
3. Métodos numéricos	31
3.1. Descripción general	31
3.2. Métodos de descomposición de operadores	32
3.2.1. Esquemas multiplicativos: sistemas hamiltonianos y métodos simplécticos	37
3.2.2. Esquemas aditivos: métodos afines	43
3.3. Métodos pseudoespectrales	49
3.3.1. Método pseudoespectral de Fourier	52
3.3.2. Método pseudoespectral de Hermite	56
4. Implementación computacional	63
4.1. Detalles de implementación	64
4.1.1. Aspectos computacionales de la discretización espacial	64
4.1.1.1. Método de Fourier	64
4.1.1.2. Método de Hermite	65
4.2. Uso básico del software	67
II Resultados y análisis	73
5. Desempeño de métodos de descomposición	77

5.1. Metodología y métricas para la evaluación de desempeño	77
5.2. Experimentos numéricos	79
5.2.1. Ecuación de Schrödinger no lineal cúbica (NLSE3)	80
5.2.2. Ecuación de Schrödinger no lineal fraccionaria (fNLSE3)	86
5.2.3. Ecuación de reacción–difusión de Fisher	90
5.2.4. Ecuación compleja de Ginzburg–Landau (CGLE)	93
5.2.5. Ecuación fraccionaria de Ginzburg–Landau (fCGLE)	94
6. Adaptatividad temporal de métodos de descomposición	99
6.1. Estimación del error local	100
6.1.1. Métodos multiplicativos adaptativos	101
6.1.2. Métodos afines adaptativos	102
6.2. Control de tamaño de paso	103
6.3. Ejemplo numérico: aplicación a la NLSE3	104
6.4. Ejemplo numérico: aplicación a la CGLE5	110
7. Conclusiones y perspectivas	119
A. Cálculo de los propagadores no lineales	125
B. Algoritmo de continuación numérica	127
C. Conservación del Hamiltoniano	129
Bibliografía	130

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación y contexto

En el presente trabajo se investigan métodos numéricos para la solución eficiente de ecuaciones en derivadas parciales (EDP) que modelizan la evolución de sistemas físicos, en particular modelos dispersivos, disipativos, no lineales y no locales. Dentro del campo del modelado de sistemas físicos, las EDP asumen un rol protagónico dado que muchos fenómenos fundamentales se desarrollan en el continuo espacio-temporal y su dinámica responde a leyes que vinculan las razones de cambio espaciales y temporales de las magnitudes físicas que los caracterizan. Entre los modelos contemplados dentro de esta clase se cuentan el electromagnetismo clásico, la mecánica cuántica y la relatividad general. La centralidad de estos modelos para la Física fue y sigue siendo uno de los principales impulsos para el estudio de las EDP. Sin embargo, los métodos e ideas derivados de su análisis han trascendido ampliamente esta motivación, con ramificaciones en matemática pura y aplicada (Brezis & Browder, 1998).

Los primeros modelos físicos expresados en forma de EDP fueron concebidos para describir la elasticidad de sólidos y el movimiento de fluidos, generalizando hacia el continuo las leyes de Newton de la dinámica de partículas (Newton, 2011; Goldstein et al., 2002). Problemas clásicos enunciados y resueltos en esta primera etapa fueron los de la cuerda vibrante (D'Alembert, 1747) y la propagación del sonido (Euler, 1772), ambos vinculados a la *ecuación de ondas*. El estudio del movimiento adiabático de fluidos no viscosos fue iniciado por Euler (1757), mientras que el problema general del movimiento de fluidos viscosos incompresibles fue abordado progresivamente a lo largo del siglo XIX por Navier (1827), Poisson (1831), Saint-Venant (1843) y Stokes (1845), dando origen a las *ecuaciones de Navier-Stokes*, cuya centralidad en la matemática aplicada tanto desde el punto de vista teórico como práctico continúa hasta la actualidad (Batchelor, 2000). Paralelamente, el interés sobre los fenómenos termodinámicos impulsado por el estudio de las máquinas térmicas en el contexto de la Revolución Industrial condujo a la formulación de la *ecuación del calor*, introducida por Fourier en 1822 junto con el método de solución mediante series trigonométricas que lleva su nombre (Fourier, 2009). A mediados del siglo XIX las investigaciones sobre fenómenos eléctricos y magnéticos, que acumulaban para ese entonces una multiplicidad de datos empíricos y resultados teóricos parciales, fueron sintetizadas

en 1865 en el sistema de *ecuaciones de Maxwell* del electromagnetismo (Jackson, 1998; Greiner, 2012). Durante el mismo período, la original y profunda generalización de las ideas de Newton y Euler realizada por Lagrange y Hamilton puso a la mecánica en conexión con la óptica y los fenómenos ondulatorios bajo la forma de la *ecuación de Hamilton-Jacobi* (Lanczos, 1970; Arnol'd, 1989; Goldstein et al., 2002). Esta última resultó decisiva como punto de apoyo para la concepción de la *ecuación de Schrödinger* de la mecánica cuántica, que describe la dinámica de partículas a escala atómica, dando cuenta de la *dualidad* entre *trayectorias de partículas* y *ondas* (Schrödinger, 2003).

En general, solo algunos casos particulares de EDP admiten soluciones expresables en forma explícita, exacta y/o analítica, y generalmente esto es posible introduciendo simplificaciones o aproximaciones más o menos groseras. Particularmente elusivos a este tipo de soluciones son los problemas no lineales. Por lo tanto, el estudio general de las EDP requiere, complementariamente al abordaje analítico vinculado al buen planteo del problema y a las propiedades generales de sus soluciones, alguna clase de cálculo numérico implementado bajo la forma de un *algoritmo* que permita la *aproximación* de dichas soluciones con un grado de exactitud y eficiencia aceptables según el problema que se pretende resolver. Exceptuando los problemas más sencillos, el estudio numérico de las EDP resultó demorado por limitaciones en la tecnología de cálculo disponible, por lo que la mayoría de las investigaciones en este campo quedó confinada al ámbito de las técnicas analíticas hasta mediados del siglo XX. Un esfuerzo temprano en el uso de métodos numéricos fue el intento de predicción del clima por Richardson (1922), protagonista central de esta tesis en virtud del papel destacado que cumple la clásica técnica de extrapolación asociada a su nombre (Richardson, 1911; Richardson & Gaunt, 1927). El desarrollo de computadoras digitales a partir de la década de 1940 favoreció la utilización de los métodos numéricos, que se convirtieron en una herramienta fundamental de investigación científica. Estudios inaugurales en esta nueva etapa fueron los experimentos computacionales de Fermi et al. (1955) sobre osciladores acoplados no lineales y los de Zabusky & Kruskal (1965) sobre el límite continuo del mismo sistema, cuyo comportamiento vincularon a la ecuación de Korteweg & de Vries (1895) y a la existencia de *solitones*: soluciones estables, localizadas y débilmente interactuantes de ecuaciones no lineales (Drazin & Johnson, 1989) cuyo primer registro científico data de las observaciones de Russell (1844) sobre ondas de agua en canales. Estos primeros estudios numéricos y la comprensión derivada de los mismos abrieron las puertas a la solución analítica de la ecuación de Korteweg y de Vries mediante la técnica de la *transformada dispersiva inversa*¹ (Gardner et al., 1967). La misma técnica fue posteriormente aplicada con éxito a otros problemas como la ecuación de Schrödinger no lineal (NLSE), allanando el camino para el estudio general de la integrabilidad de las EDP no lineales² (Ablowitz, 2011).

Destacándose entre los ejemplos mencionados, la *ecuación de Schrödinger no lineal cúbica* (NLSE3) constituye un modelo canónico para el estudio de la evolución de paquetes de onda cuasi

¹IST, *Inverse Scattering Transform*.

²En un sentido distinto, ortogonal al mencionado, un hito importante lo constituye el trabajo de Lorenz (1963) sobre modelos de convección atmosférica, cuyos experimentos numéricos revelaron la extrema sensibilidad de ciertos sistemas respecto de las condiciones iniciales, característica distintiva de los *sistemas dinámicos caóticos* (Hirsch et al., 2012; Strogatz, 2018).

monocromáticos en medios dispersivos, débilmente no lineales y sin disipación, condiciones que se presentan en numerosos fenómenos ópticos e hidrodinámicos de importancia (Sulem & Sulem, 1999; Ablowitz, 2011). Entre sus múltiples aplicaciones, este modelo describe la propagación de luz láser en fibras y resonadores ópticos cuando los efectos disipativos pueden despreciarse, adquiriendo una enorme importancia por su impacto en tecnologías de comunicación recientes. En efecto, la existencia de solitones para la NLSE3, demostrada en el trabajo pionero de Shabat & Zakharov (1972) y propuesta por Hasegawa & Tappert (1973) como mecanismo para la transmisión de información mediante pulsos de luz en fibras ópticas, fue verificada experimentalmente por Mollenauer et al. (1980), iniciando una revolución en las comunicaciones cuyas consecuencias se prolongan hasta la actualidad (Mollenauer & Gordon, 2006; Agrawal, 2019). Por otra parte, los efectos disipativos solo pueden ignorarse cuando las longitudes o los tiempos característicos de propagación de los pulsos son suficientemente cortos. De otro modo, se vuelve necesario incorporar al modelo mecanismos que compensen las pérdidas de energía durante la propagación. Entramos así en el terreno de modelos *no conservativos*, en los que la noción de solitón debe generalizarse para contemplar soluciones cuya estabilidad en el tiempo y el espacio resulta del balance energético entre el sistema y su ambiente, además del equilibrio entre dispersión y no linealidad característico de los solitones clásicos. El estudio analítico y numérico de estos *solitones disipativos* (Akhmediev & Ankiewicz, 2008; Purwins et al., 2010; Ferreira, 2022) ha sido realizado principalmente en el marco de la ecuación compleja de Ginzburg–Landau (CGLE) y sus variantes, revelando una enorme riqueza dinámica (Akhmediev et al., 1996, 2001; Akhmediev & Ankiewicz, 2001; Aranson & Kramer, 2002). Experimentos recientes han permitido la observación de numerosos fenómenos anticipados por los estudios analíticos y numéricos llevados a cabo sobre estos modelos (Cundiff et al., 2002; Renninger et al., 2008; Grellu & Akhmediev, 2012).

El recorrido histórico esbozado es solo una muestra posible de la fertilización cruzada entre desarrollos analíticos, métodos numéricos y observaciones experimentales involucrada en el conocimiento de estos modelos y sus aplicaciones, cuya relevancia surge tanto del interés puramente científico como de su impacto tecnológico. Dentro de esta triada metodológica, el énfasis de nuestro trabajo está puesto en el desarrollo de métodos numéricos adecuados al tratamiento de algunos de los modelos mencionados previamente y sus generalizaciones recientes. Más específicamente, investigamos *métodos de descomposición de operadores (splitting)* para el estudio de modelos conservativos basados en la NLSE y modelos disipativos de la familia de la CGLE, incluyendo variantes fraccionarias que han generado interés en los últimos años y están siendo intensamente investigadas (Laskin, 2000; Weitzner & Zaslavsky, 2003; Guo & Huang, 2012; Frank & Lenzmann, 2013; Klein et al., 2014; Longhi, 2015; Duo & Zhang, 2016; Mao & Shen, 2017; Tang et al., 2018; Qiu et al., 2020; Liu et al., 2023).

Los métodos de descomposición de operadores son estrategias muy versátiles y generales para atacar problemas de evolución complejos que involucran múltiples fenómenos, dimensiones y escalas (McLachlan et al., 2002; Hairer et al., 2006; Holden et al., 2010; Borgna et al., 2015; De Leo et al., 2016; Blanes & Casas, 2017; Glowinski et al., 2017). Estos métodos construyen la solución del problema original de evolución descomponiéndolo en subproblemas más simples

o convenientes y combinando de manera oportuna las soluciones de estos últimos, permitiendo aplicar esquemas de solución especializados a cada subproblema. Dado que solo excepcionalmente dichas soluciones pueden obtenerse analíticamente, los métodos de descomposición de operadores suelen combinarse con alguna técnica de discretización en las variables espaciales, como diferencias finitas (Morton & Mayers, 2005), elementos finitos (Johnson, 2012), métodos espectrales (Fornberg, 1996; Boyd, 2000; Trefethen, 2000; Canuto et al., 2007; Hesthaven et al., 2007; Kopriva, 2009; Shen et al., 2011) y métodos sin malla (Fornberg & Flyer, 2015). En particular, combinaciones de *splitting* de operadores y métodos espectrales han sido utilizadas ampliamente en la simulación numérica de la NLSE debido a su elevada exactitud y eficiencia en problemas con soluciones muy regulares (Taha & Ablowitz, 1984; Weideman & Herbst, 1986; Pathria & Morris, 1990; Muslu & Erbay, 2005). Más recientemente, la realización experimental del fenómeno estadístico–cuántico denominado *condensación de Bose–Einstein* (Carretero-González et al., 2008) inspiró la aplicación de estas técnicas al estudio numérico de una variante de la NLSE que modela dicho fenómeno, la *ecuación de Gross–Pitaevskii* (GPE) (Bao et al., 2003; Bao & Shen, 2005; Antoine et al., 2013). Paralelamente, florecieron las investigaciones rigurosas acerca de las propiedades generales de dichos métodos, incluyendo la convergencia de esquemas de alto orden (Thalhammer et al., 2009; Gauckler, 2011; Thalhammer, 2012).

Es conocido que métodos de descomposición multiplicativos denominados *simplécticos* son particularmente adecuados para modelos *hamiltonianos* como la NLSE y la GPE ya que conservan algunos invariantes de la dinámica a nivel numérico (Antoine et al., 2013). Métodos con estas propiedades forman parte de la familia de los *integradores geométricos*, diseñados especialmente para preservar ciertas simetrías y constantes de movimiento del sistema que se está integrando (Sanz-Serna & Calvo, 1994; McLachlan et al., 2002; Leimkuhler & Reich, 2004; Hairer et al., 2006; Blanes & Casas, 2017).

A pesar de las múltiples virtudes que los caracterizan cuando se aplican a problemas hamiltonianos, se ha establecido que los esquemas de descomposición multiplicativos de orden superior a dos pueden resultar numéricamente inestables en problemas irreversibles debido a que requieren pasos de integración negativos (Goldman & Kaper, 1996; Blanes & Casas, 2005). Dado que el problema de valores iniciales para ecuaciones de tipo reacción–difusión y ecuaciones de Ginzburg–Landau resulta mal planteado para tiempos negativos, estos solo pueden atacarse en general recurriendo a los esquemas multiplicativos de orden más bajo y por lo tanto requieren tamaños de paso muy pequeños y elevado costo computacional para alcanzar altos niveles de exactitud³. Aunque algunos trabajos recientes muestran la estabilidad de métodos multiplicativos de orden 3 y 4 en problemas de reacción–difusión específicos, los resultados no son extrapolables a modelos irreversibles genéricos, obligando a un análisis caso por caso (Cervi & Spiteri, 2018, 2019).

Para subsanar esta limitación y preservar la generalidad y versatilidad de la estrategia de descomposición de operadores con independencia del carácter reversible o irreversible del pro-

³En la literatura de óptica no lineal, el método numérico más habitual para la simulación de sistemas ópticos es el denominado *split-step Fourier method* (SSFM), un esquema de descomposición de orden uno o dos con una discretización pseudoespectral (Agrawal, 2019). En particular, Akhmediev et al. (2001) utilizan esta clase de métodos en su exhaustiva exploración numérica de la CGLE.

blema, [De Leo et al. \(2016\)](#) introdujeron esquemas alternativos de descomposición de alto orden construidos por extrapolación que no requieren pasos negativos, denominados *métodos afines*. En su artículo, de carácter fundamentalmente teórico, estos autores prueban rigurosamente la convergencia de los métodos afines para problemas semilineales requiriendo condiciones muy generales sobre los operadores y datos iniciales que contemplan todos los modelos de interés del presente trabajo. Sin embargo, el desempeño práctico de dichos métodos no es puesto en consideración y solo se reportan algunos ejemplos numéricos elementales con el fin de verificar el orden de convergencia teórico. De igual modo, se conjeturan algunas posibilidades de optimización de los métodos que no son exploradas. Por lo tanto, *el tema principal de esta tesis es la implementación e investigación del desempeño de los métodos afines y sus posibles generalizaciones*, con el fin de determinar su exactitud, eficiencia y estabilidad en el contexto de los modelos reversibles e irreversibles analizados. Además del aporte que significa caracterizar el rendimiento computacional de estos métodos en un espectro de problemas relevantes, otra contribución original de nuestro trabajo consiste en *proponer, implementar y evaluar optimizaciones no contempladas en la propuesta inicial, específicamente técnicas de adaptatividad temporal*, cuyo desempeño contrastamos respecto de métodos que representan el estado del arte en la materia.

1.2. Comunicaciones y publicaciones relacionadas

El trabajo original que derivó en la presente investigación está relacionado con la solución de ecuaciones no lineales de tipo Schrödinger. El buen planteo de un problema con estas características fue presentado en el *V Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (MACI 2015)* y originó la publicación

- [Raviola & De Leo \(2015\)](#) *Buen planteo para una ecuación de Schrödinger no elíptica*. Matemática Aplicada, Computacional e Industrial **5**, 105–107. ISSN: 2314-3282.

Un tratamiento numérico preliminar del mismo problema, incorporando resultados recientes sobre métodos de integración basados en descomposición de operadores publicados en [Borgna et al. \(2015\)](#) y [De Leo et al. \(2016\)](#), se presentó en el *VI Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (MACI 2017)* y fue publicado como

- [Raviola & De Leo \(2017\)](#) *Tratamiento numérico para una ecuación de Schrödinger no elíptica*. Matemática Aplicada, Computacional e Industrial **6**, 40–43. ISSN: 2314-3282.

Apoyándonos en las herramientas computacionales desarrolladas para el trabajo anterior y reconociendo su potencialidad para el estudio de problemas de evolución más generales –tanto reversibles como irreversibles–, iniciamos el estudio del desempeño relativo de los *métodos afines* propuestos en [De Leo et al. \(2016\)](#) respecto de los esquemas de descomposición multiplicativos encontrados habitualmente en la literatura, obteniendo resultados competitivos e identificando posibilidades de optimización mediante adaptatividad y paralelismo. Estos resultados sugirieron concentrar el foco de nuestra investigación en la caracterización de estos novedosos

métodos de descomposición, que fueron aplicados con éxito a la solución numérica de ecuaciones de Schrödinger no lineales y ecuaciones complejas de Ginzburg–Landau, incluyendo variantes fraccionarias de interés actual en óptica no lineal. Durante esta parte de la investigación mostramos que el desempeño de los esquemas propuestos es equivalente o superior en muchos aspectos al de los métodos de descomposición simplécticos, incluso en problemas para los cuales estos últimos están especialmente diseñados. Los resultados fueron comunicados en el IX Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (MACI 2023), dando lugar a la publicación

- [Raviola & De Leo \(2023\)](#) *Desempeño de métodos de descomposición afín en ecuaciones fraccionarias de Ginzburg-Landau*. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial* **9**, 55–58. ISSN: 2314-3282.

Un trabajo ampliado que reporta resultados adicionales respecto a la conservación de invariantes a partir de una investigación numérica exhaustiva, además de incluir el estudio de la ecuación compleja fraccionaria de Ginzburg–Landau con no linealidades cúbico-quínticas, ha sido publicado en la revista *Applied Mathematics and Computation*. En el Capítulo 5 de esta tesis se exponen estos aportes:

- [Raviola & De Leo \(2024\)](#) *Performance of affine-splitting pseudo-spectral methods for fractional complex Ginzburg-Landau equations*. *Applied Mathematics and Computation* **466**, 128428.

Por último, los avances relativos a la incorporación de técnicas de adaptatividad temporal a los métodos afines y los resultados originales obtenidos, competitivos respecto de esquemas adaptativos que constituyen el estado del arte, fueron presentados en el XVII Congreso Dr. Antonio Monteiro bajo el título «Adaptatividad temporal de métodos de descomposición para ecuaciones de evolución» y se publican por primera vez en el Capítulo 6 de esta tesis.

Un trabajo numérico complementario, vinculado a un problema de valores de frontera y tratado con otros métodos se publicó como

- [Raviola et al. \(2023\)](#) *Caracterización de soluciones no triviales para un sistema de ecuaciones de Ginzburg-Landau débilmente acopladas: estudio numérico*. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial* **9**, 114–117. ISSN: 2314-3282.

1.3. Organización de la tesis

La presente tesis está dividida en dos Partes.

En la Parte I desarrollamos el *marco teórico*, detallando los *modelos y métodos* utilizados a los fines de contextualizar el trabajo realizado. Dentro de esta Parte, el Capítulo 2 introduce el problema de evolución general y las instancias particulares del problema (modelos) que abordamos en lo sucesivo. En el Capítulo 3 describimos los métodos numéricos que son investigados y caracterizados. El Capítulo 4 expone algunos detalles de implementación y utilización de la herramienta de *software* construida especialmente para la concreción de este trabajo, cuyo código fuente se encuentra disponible sin restricciones.

En la Parte II presentamos los *resultados obtenidos*. En el Capítulo 5 contrastamos distintos métodos de descomposición de operadores. La exhaustiva exploración numérica de los modelos introducidos en el Capítulo 2 mediante los métodos del Capítulo 3 arroja *resultados novedosos sobre el desempeño de los métodos afines* investigados en este trabajo. En el Capítulo 6 incorporamos *estrategias de adaptatividad temporal* a los métodos afines y mostramos que los esquemas numéricos resultantes se desempeñan muy favorablemente respecto de métodos de descomposición multiplicativos adaptativos que constituyen el estado del arte en la materia. En el Capítulo 7 presentamos las conclusiones de nuestro trabajo y discutimos posibles generalizaciones y extensiones. Por último, los Apéndices A, B y C incluyen desarrollos analíticos y numéricos referenciados en diversas secciones y derivados al final para facilitar la lectura del cuerpo principal del texto.

Parte I

Modelos y métodos

Resumen

En esta Parte exponemos el marco teórico general necesario para el desarrollo de la tesis.

En el Capítulo 2 introducimos el *problema abstracto de evolución* y los modelos particulares que estudiamos en esta tesis. Específicamente, presentamos *modelos hamiltonianos* basados en la *ecuación de Schrödinger no lineal cúbica* (NLSE3) y *modelos disipativos* basados en la *ecuación compleja de Ginzburg–Landau cúbico–quintica* (CGLE5). Contemplamos también variantes no locales de la NLSE y la CGLE que incluyen un operador Laplaciano fraccionario, de relevancia en problemas contemporáneos. Además de su importancia intrínseca como modelos de diversos fenómenos o procesos de interés científico y tecnológico, estos permiten evaluar y contrastar las características de los distintos métodos numéricos que investigamos en esta tesis en situaciones cualitativamente diversas.

En el Capítulo 3 describimos los métodos utilizados para aproximar numéricamente las soluciones de los modelos anteriores en diversas situaciones. En la Sección 3.2 desarrollamos *métodos de descomposición o «splitting» de operadores*, de interés central en este trabajo, en dos variantes que denominamos *métodos multiplicativos o simplécticos* y *métodos aditivos o afines*. Los métodos multiplicativos vienen siendo utilizados desde hace varias décadas como *integradores geométricos*, esto es, esquemas diseñados para preservar numéricamente invariantes dinámicos en problemas que poseen cantidades conservadas. Sin embargo, es conocido que los métodos de esta clase de orden superior a dos son susceptibles de inestabilidades numéricas en problemas irreversibles. En consecuencia, los métodos afines se proponen como esquemas numéricos de alto orden que resuelven esta dificultad sin renunciar a la versatilidad de las estrategias de descomposición de operadores. Además, poseen virtudes que los vuelven particularmente atractivos como esquemas de descomposición de propósito general, entre ellas la posibilidad de paralelización y la compatibilidad con técnicas adaptativa temporal. Las virtudes y potencialidades de los métodos afines, objeto de estudio central de esta tesis, se discuten aquí para contextualizar los resultados originales obtenidos mediante su aplicación y reportados en la Parte II.

Salvo casos muy particulares que admiten solución analítica, los métodos de descomposición requieren la discretización de las funciones y operadores que intervienen en el problema para su tratamiento computacional. Por ello, en la Sección 3.3 se describen los *métodos pseudo-espectrales* a los que recurrimos con esta finalidad.

Capítulo 2

Modelos

2.1. Problema general

Investigamos en esta tesis métodos numéricos para la solución de problemas de evolución planteados bajo la forma general

$$\text{PVI} : \begin{cases} i\partial_t u(x, t) = Au(x, t) + B(u(x, t)), & x \in \mathbb{R}, t \geq 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), \end{cases} \quad (2.1)$$

siendo el dato inicial $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ un elemento de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . A es un operador lineal cerrado con dominio $D(A)$ densamente definido en \mathcal{H} que genera un semigrupo fuertemente continuo, dado por un *multiplicador de Fourier con símbolo* $\mathcal{A} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$

$$\widehat{Au}(k, \cdot) = \mathcal{A}(k)\widehat{u}(k, \cdot), \quad (2.2)$$

a partir de la Transformada de Fourier unitaria

$$\widehat{u}(k, \cdot) := \mathcal{F}[u(x, \cdot)](k, \cdot) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} u(x, \cdot) e^{-ikx} dx, \quad (2.3)$$

y $B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ es un mapa localmente Lipschitz tal que $B(0) = 0$. Bajo estas hipótesis, el problema de valores iniciales abstracto 2.1 está bien planteado (Cazenave & Haraux, 1998) y abarca muchos modelos de fenómenos y procesos relevantes en ciencia y tecnología, como ecuaciones de Schrödinger lineales y no lineales, ecuaciones de Schrödinger–Poisson, ecuaciones de Gross–Pitaevskii, ecuaciones de difusión–reacción y ecuaciones complejas de Ginzburg–Landau, entre otros (Borgna et al., 2015; De Leo et al., 2016). En este contexto, estudiamos métodos numéricos eficientes para la solución del problema general 2.1 mediante estrategias de descomposición (*splitting*) de operadores (McLachlan et al., 2002; Blanes et al., 2008; Holden et al., 2010; Borgna et al., 2015; Blanes & Casas, 2017; De Leo et al., 2016; Glowinski et al., 2017) cuyos detalles se desarrollan en el Capítulo 3 y constituyen el objeto de estudio principal de esta tesis. En particular, utilizamos los métodos investigados para resolver numéricamente ecuaciones de Schrödinger no lineales (Sulem & Sulem, 1999) y ecuaciones complejas de Ginzburg–Landau

(Aranson & Kramer, 2002; Akhmediev & Ankiewicz, 2008; García-Morales & Krischer, 2012), contemplando variantes con operadores diferenciales fraccionarios (no locales) de interés actual en el campo de la óptica no lineal, entre otras áreas (Laskin, 2000; Klein et al., 2014; Longhi, 2015; Qiu et al., 2020; Liu et al., 2023).

En las siguientes secciones presentamos las instancias particulares del problema general 2.1 que exploramos en esta tesis, a las que recurrimos como banco de prueba de los métodos numéricos desarrollados, discutiendo brevemente las motivaciones físicas y las propiedades más relevantes para los fines de este trabajo.

2.2. Modelos conservativos: ecuaciones tipo Schrödinger

La ecuación de Schrödinger fue propuesta por Erwin Schrödinger en 1925 para describir la evolución no relativista de la función de onda asociada a un sistema cuántico aislado (Schrödinger, 2003). Si dicho sistema cuántico es una partícula de masa m moviéndose en una dimensión bajo la acción de un potencial independiente del tiempo $V(x)$, la ecuación asume la forma

$$i\hbar\partial_t u(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x) \right] u(x, t) =: Hu(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}, \quad (2.4)$$

siendo $\hbar \approx 1,055 \cdot 10^{-34}$ J · s la constante de Planck reducida, H el operador autoadjunto denominado *Hamiltoniano* vinculado a la *energía* del sistema y $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ la función de onda de la partícula, que debido a la interpretación probabilística conocida como *regla de Born* debe satisfacer

$$\int_{\mathbb{R}} |u(x, t)|^2 dx = 1. \quad (2.5)$$

Variantes no lineales de esta ecuación surgen como modelos cuánticos efectivos de sistemas de muchas partículas en la aproximación de campo medio. En particular, un gas diluido de N bosones de masa m a una temperatura suficientemente baja confinado mediante un potencial externo $V(\mathbf{x})$ e interactuando mediante un potencial interatómico efectivo *puntual* (esto es, un *condensado de Bose–Einstein*) satisface la *ecuación de Gross–Pitaevskii* (Carretero-González et al., 2008)

$$i\hbar\partial_t u(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{x}}^2 + V(\mathbf{x}) + \gamma|u(\mathbf{x}, t)|^2 \right] u(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad (2.6)$$

donde la densidad de partículas verifica la condición $\int_{\mathbb{R}^d} |u(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = N$. En el caso $d = 1$ esta fórmula puede interpretarse como una versión de la ecuación 2.4 que incluye un potencial no lineal adicional que depende de la densidad de partículas $|u|^2$. El signo del coeficiente de interacción γ determina si esta es *repulsiva* ($\gamma > 0$) o *atractiva* ($\gamma < 0$).

La ecuación anterior es una de las formas que asume la *ecuación de Schrödinger no lineal cúbica* (NLSE3) unidimensional. La forma canónica de esta ecuación se obtiene cuando $V(x) = 0$ (tras

adecuadas transformaciones de escala)

$$i\partial_t u(x, t) = -\frac{1}{2}\partial_x^2 u(x, t) + \gamma |u(x, t)|^2 u(x, t). \quad (2.7)$$

La ecuación se denomina *enfocante* o *atractiva* cuando $\gamma < 0$, y *desenfocante* o *repulsiva* cuando $\gamma > 0$. Este modelo matemático no solo aparece en problemas derivados de la mecánica cuántica, sino que surge sin conexión con esta en fenómenos de óptica no lineal, hidrodinámica y física de plasmas, entre otros. Ha sido investigado extensamente tanto por sus interesantes propiedades matemáticas como por sus variadas aplicaciones (Sulem & Sulem, 1999; Ablowitz, 2011). Su ubicuidad es consecuencia de su universalidad, siendo la descripción más básica de la propagación de un paquete de ondas cuasi monocromático en un medio dispersivo y débilmente no lineal. En lo que sigue, daremos una deducción formal de este modelo a partir de consideraciones generales. Para anclarlo a un problema concreto e intuitivo, interpretaremos el modelo en el contexto de la propagación de pulsos electromagnéticos en una fibra óptica, aunque no entraremos en los detalles técnicos específicos de la modelización del problema, que pueden encontrarse en la bibliografía. Elegimos este ejemplo por ser una de las aplicaciones más relevantes debido a su impacto en tecnologías de comunicación (Hasegawa & Tappert, 1973; Mollenauer et al., 1980; Mollenauer & Gordon, 2006; Agrawal, 2019).

Supongamos un medio unidimensional (en este caso, una fibra óptica) en el que puede propagarse un campo (el campo electromagnético) representado por la función escalar compleja $u(x, t)$. Una propiedad esencial del medio para caracterizar la propagación es la dependencia del número de onda k con la frecuencia angular ω de la onda, esto es la *relación de dispersión*¹ $k = k(\omega)$ (Whitham, 2011). Para ondas electromagnéticas planas en el vacío, la relación de dispersión es lineal $k = \omega/c$, siendo c la velocidad de la luz. En un medio dieléctrico isotrópico no absorbente, esta relación es $k(\omega) = n(\omega)\omega/c$, siendo $n(\omega)$ el *índice de refracción*² a la frecuencia angular ω , por lo que ondas planas de distinta frecuencia se mueven a distintas velocidades produciéndose *dispersión*. En general, un medio para el cual $k(\omega)$ sea una función real con $k''(\omega) \neq 0$ se denomina *dispersivo*.

Para una onda plana propagándose en el sentido positivo de x

$$U(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)},$$

la *fase* de la onda es

$$\phi(x, t) = kx - \omega t.$$

Un observador moviéndose a velocidad $v_p = dx/dt$ medirá una condición de *fase constante* si

$$\frac{d\phi}{dt}(x, t) = kv - \omega = 0,$$

esto es, si se mueve a la *velocidad de fase* $v_p = \omega/k$ a la que avanza la onda plana. Si super-

¹En otros contextos, se denomina relación de dispersión a la inversa $\omega = \omega(k)$.

²El índice de refracción de un material óptico no absorbente es el cociente entre la velocidad de la luz c y la velocidad de propagación de una onda de frecuencia ω .

ponemos dos ondas planas de frecuencias levemente diferentes en un medio dispersivo, estas se moverán a velocidades distintas y obtendremos una onda modulada, cuya amplitud será mayor donde las ondas estén en fase (interferencia constructiva) y menor donde se encuentren en oposición de fase (interferencia destructiva). Para moverse con la *envolvente* de la modulación, un observador deberá avanzar a una velocidad v tal que la diferencia de fase entre las ondas se mantenga constante. En efecto, supongamos que en el instante t_0 y un punto x_0 la diferencia de fase entre las ondas es nula y hay interferencia constructiva (el argumento es similar con cualquier otra fase inicial). Si el observador se mueve a velocidad v se encontrará en $x_0 + v\Delta t$ al cabo de un intervalo de tiempo Δt , mientras que la primera onda avanzó una distancia $v_1\Delta t$ y la segunda $v_2\Delta t$. En esta nueva posición, la fase de la primera onda será $k_1(v - v_1)\Delta t$ y la de la segunda será $k_2(v - v_2)\Delta t$, por lo que la nueva diferencia de fase será $\Delta\phi = (k_1 - k_2)v\Delta t - (k_1v_1 - k_2v_2)\Delta t$. Para que esta diferencia de fase sea constante en el tiempo, debe ser $\Delta\phi/\Delta t = 0$ y por lo tanto

$$v = \frac{k_1v_1 - k_2v_2}{k_1 - k_2} = \frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2}.$$

En el límite de diferencias de frecuencia pequeñas, obtenemos la *velocidad de grupo*

$$v = v_g(\omega) = \frac{d\omega}{dk},$$

que es la velocidad a la que se mueve la envolvente de un *paquete de ondas* (o *pulso*) cuya frecuencia central es ω . Si el paquete de ondas contiene un rango de frecuencias alrededor de ω lo suficientemente amplio para que $v_g(\omega)$ varíe apreciablemente, este se deformará al propagarse, fenómeno denominado *dispersión de la velocidad de grupo*.³

Consideremos que a través del medio se propaga un *pulso* $U(x, t)$ dado por una onda monocromática *portadora* de frecuencia ω_0 y número de onda $k_0 = k(\omega_0)$ modulada por una *envolvente* $u(x, t)$, esto es

$$U(x, t) = u(x, t)e^{i(k_0x - \omega_0t)}.$$

Si la envolvente varía lentamente en el tiempo, de tal modo que el pulso contenga muchas oscilaciones de la onda portadora, es esperable que las componentes espectrales de U estén concentradas alrededor de la frecuencia central ω_0 , esto es $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ siendo $\Delta\omega$ el ancho de banda del pulso. En este caso decimos que el pulso es *cuasi-monocromático*, o equivalentemente que nos encontramos en la *aproximación de envolvente lentamente variable*.⁴ Supongamos además que el índice de refracción del medio no solo depende de la frecuencia de la onda ω

³Conocido como GVD por las siglas en inglés del término *Group Velocity Dispersion*.

⁴Aproximación denominada SVEA, acrónimo de *Slowly Varying Envelope Approximation*.

sino también de su intensidad $|U|^2$ en la forma general⁵

$$n(\omega, |U|^2) = n(\omega) + n_2|u|^2.$$

Consecuentemente, la relación de dispersión resulta

$$k(\omega, |u|^2) = k(\omega) + k_{NL}(\omega)|u|^2,$$

donde hemos definido $k_{NL}(\omega) = n_2\omega/c$. Deseamos obtener la ecuación que satisface la envolvente del pulso al propagarse en dicho medio. Desarrollando la relación de dispersión alrededor de $\omega = \omega_0$, $|u|^2 = 0$ en potencias de $(\omega - \omega_0)$ y $|u|^2$ (hasta segundo y primer orden, respectivamente) obtenemos

$$k = k(\omega, |u|^2) \cong k_0 + k'(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2}k''(\omega - \omega_0)^2 + k_{NL}(\omega_0)|u|^2 \quad (2.8)$$

con $k_0 = k(\omega_0)$, $k' = \frac{dk}{d\omega}(\omega_0) = v_g^{-1}(\omega_0)$ y $k'' = \frac{d^2k}{d\omega^2}(\omega_0)$. Podemos expresar la envolvente $u(x, t)$ mediante su transformada de Fourier $\hat{u}(k - k_0, \omega - \omega_0)$ alrededor de (k_0, ω_0) como

$$u(x, t) = \mathcal{F}^{-1}(\hat{u}(k - k_0, \omega - \omega_0)) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(k - k_0, \omega - \omega_0) e^{-i(k-k_0)x + i(\omega-\omega_0)t} dk d\omega.$$

Derivando bajo el signo integral, la expresión anterior conduce a la siguiente correspondencia de operadores de derivación y multiplicación

$$\begin{aligned} \partial_x u(x, t) &= \mathcal{F}^{-1}(-i(k - k_0)\hat{u}) \implies i\partial_x \leftrightarrow k - k_0, \\ \partial_t u(x, t) &= \mathcal{F}^{-1}(i(\omega - \omega_0)\hat{u}) \implies -i\partial_t \leftrightarrow \omega - \omega_0. \end{aligned}$$

Por lo tanto, multiplicando la relación de dispersión 2.8 por $\hat{u}(k - k_0, \omega - \omega_0)$ y antitransformando obtenemos la ecuación de la envolvente

$$(i\partial_x + ik'\partial_t) u(x, t) = \frac{1}{2}k''\partial_t^2 u(x, t) - k_{NL}|u|^2 u(x, t). \quad (2.9)$$

Por último, realizamos la transformación de coordenadas que nos lleva a un sistema de referencia que se mueve a la velocidad de grupo $v_g(\omega_0)$ a la que avanza la envolvente del pulso

$$\begin{aligned} T &= t - k'x = t - \frac{x}{v_g(\omega_0)}, \\ X &= x, \end{aligned}$$

⁵Este fenómeno, conocido como *efecto Kerr*, se produce en los medios dieléctricos utilizados habitualmente para guiar la luz en fibras ópticas. Su contribución al índice de refracción se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell al considerar la polarización no lineal del dieléctrico y descartando la contribución cuadrática por razones de simetría (Mollenauer & Gordon, 2006; Agrawal, 2019).

de tal modo que

$$\begin{aligned} u(X(x, t), T(x, t)) &= u(x, t - k'x), \\ \partial_X u(x(X, T), t(X, T)) &= \partial_x u(x, t) + k' \partial_t u(x, t), \\ \partial_T u(x, t) &= \partial_t u(x, t). \end{aligned}$$

La ecuación 2.9 es equivalente en las nuevas variables a

$$i \partial_X u(X, T) = \frac{1}{2} k'' \partial_T^2 u(X, T) - k_{NL} |u(X, T)|^2 u(X, T).$$

Mediante un oportuno cambio de escala y retornando a las variables independientes originales, la ecuación anterior puede ponerse en la forma

$$i \partial_x u(x, t) = -\frac{1}{2} \partial_t^2 u(x, t) + \gamma |u|^2 u(x, t). \quad (2.10)$$

Puede apreciarse que las expresiones 2.7 y 2.10 son formalmente equivalentes, pero el rol de las variables está invertido (la misma ecuación se obtiene como modelo matemático de fenómenos cuya interpretación física es diferente). En lo que sigue, nos ocuparemos de la ecuación en la forma 2.7, más próxima a la ecuación de Schrödinger lineal. Si $\gamma < 1$ (caso enfocante) la ecuación admite soluciones denominadas *solitones brillantes*. Los solitones son soluciones estables y localizadas de ecuaciones no lineales (Drazin & Johnson, 1989) y son la manifestación de un balance entre dispersión y no linealidad en sistemas integrables. En el caso de solitones ópticos este equilibrio surge de la compensación entre el ensanchamiento temporal del pulso provocado por la dispersión y el efecto contrario (autoenfocante) resultante de la dependencia del índice de refracción con la amplitud. El solitón fundamental de la ecuación 2.7 para el caso enfocante con $\gamma = -1$ es de la forma (Sulem & Sulem, 1999; Al Khawaja & Al Sakkaf, 2019)

$$u_{\text{sol}}^{\text{NLS3}}(x, t) = \eta \operatorname{sech} [\eta(x - vt - x_0)] e^{i(vx - \omega_{\text{sol}}t + \phi_0)}, \quad (2.11)$$

siendo $\omega_{\text{sol}} = (v^2 - \eta^2)/2$ la frecuencia angular del solitón, η su amplitud, v su velocidad y x_0, ϕ_0 la posición del centro de masa y fase iniciales. Otras soluciones analíticas de esta ecuación pueden encontrarse clasificadas de manera sistemática en Al Khawaja & Al Sakkaf (2019). Soluciones de la forma 2.11 fueron propuestas por Hasegawa & Tappert (1973) como mecanismo para la transmisión de información a larga distancia mediante pulsos de luz en fibras ópticas debido a su estabilidad. Las primeras implementaciones experimentales de esta propuesta fueron realizadas por Mollenauer et al. (1980). El estado del arte de esta tecnología, de profundas implicancias en las comunicaciones contemporáneas, se desarrolla exhaustivamente en el excelente texto de Agrawal (2019).

Aunque la deducción formal anterior se interpretó en el marco de un problema óptico, en ningún momento se recurrió explícitamente a las ecuaciones de Maxwell del electromagnetismo.

mo, sino solo a la relación de dispersión 2.8⁶. Por lo tanto, resulta evidente que la NLSE3 es un modelo genérico que describe la dinámica de la envolvente de un paquete de ondas cuasimonocromático en un medio dispersivo y débilmente no lineal. En el caso unidimensional considerado, este modelo resulta completamente integrable mediante la *transformada dispersiva inversa*⁷, poseyendo infinitas cantidades conservadas, entre ellas (Ablowitz, 2011)

- la *masa, carga, potencia* o número de partículas

$$M = \int_{\mathbb{R}} |u|^2 dx, \quad (2.12)$$

- el *Hamiltoniano* o energía

$$H = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (|\partial_x u|^2 \pm |u|^4) dx, \quad (2.13)$$

- el *momento lineal*

$$P = \frac{i}{2} \int_{\mathbb{R}} (u \partial_x u^* - u^* \partial_x u) dx. \quad (2.14)$$

Notar que la NLSE3 es un caso particular de nuestro problema modelo 2.1 con

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(k) &= -\frac{1}{2} \widehat{\partial_x^2} = -\frac{1}{2} (ik)^2 = \frac{1}{2} k^2, \\ B(u) &= \gamma |u(x, t)|^2 u(x, t) \end{aligned}$$

En un contexto más general en el que $\mathcal{A}(k)$ es un símbolo real y por lo tanto A un operador autoadjunto, tenemos el siguiente invariante (al que también denominaremos Hamiltoniano) cuya conservación se prueba en el Apéndice C

$$H = \frac{1}{2} (Au, u) + \frac{1}{4} \gamma \int_{\mathbb{R}} |u|^4 dx. \quad (2.15)$$

Generalizaciones de la NLSE3 han sido propuestas para dar cuenta de situaciones más realistas, entre ellas disipación y efectos dispersivos y no lineales de orden superior.

2.3. Modelos disipativos: ecuaciones complejas de Ginzburg-Landau

Un modelo más general para el estudio de la propagación de pulsos en medios disipativos y no lineales está dado por la *ecuación compleja de Ginzburg-Landau* (CGLE). En la literatura de la comunidad de óptica no lineal esta ecuación suele escribirse en la siguiente forma, que incluye un término no lineal de quinto orden (Akhmediev & Ankiewicz, 2008)

$$i\partial_t u = \left(\frac{D}{2} - i\beta\right)(-\partial_x^2)u + i\delta u + (\gamma + i\varepsilon)|u|^2 u + (-\nu + i\mu)|u|^4 u. \quad (2.16)$$

⁶Una deducción del modelo a partir de las ecuaciones de Maxwell puede verse en Agrawal (2019).

⁷En inglés, *Inverse Scattering Transform (IST)*.

En términos del problema general 2.1 tenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(k) &= \left(\frac{D}{2} - i\beta\right)k^2 + i\delta, \\ B(u) &= (\gamma + i\varepsilon)|u|^2u + (-\nu + i\mu)|u|^4u.\end{aligned}$$

El contraste con la NLSE3 muestra que se ha introducido un término *difusivo* que produce filtrado espectral cuando $\beta > 0$, un término de ganancia lineal que resulta disipativo si $\delta < 0$, ganancias no lineales cúbicas y quínticas mediante los coeficientes ε y μ , y un término $\nu < 0$ que representa la saturación del índice de refracción no lineal. El parámetro $D = \pm 1$ representa los casos de dispersión normal y anómala, respectivamente.

Desde un punto de vista más general, ecuaciones de este tipo surgen como modelos de sistemas próximos a bifurcaciones subcríticas y permiten describir fenómenos como oscilaciones químicas en problemas de reacción–difusión, convección de fluidos binarios, superconductividad, transiciones de fase y formación de patrones espacio-temporales. El espectro de sus aplicaciones y aspectos teóricos es tan amplio que ha sido denominado «el mundo de la ecuación de Ginzburg–Landau» (Aranson & Kramer, 2002; García-Morales & Krischer, 2012).

En el ámbito de la óptica no lineal, la ecuación 2.16 permite describir osciladores ópticos paramétricos, láseres pulsados por bloqueo pasivo de modos (*passively mode-locked lasers*) (Grelu & Akhmediev, 2012; Ferreira, 2022) y láseres de fibra (Komarov et al., 2005; Renninger et al., 2008). A diferencia de la NLSE3, se trata de un modelo no integrable, por lo cual métodos aproximados y simulaciones numéricas han sido imprescindibles para la comprensión de sus propiedades generales. A pesar de esta mayor complejidad analítica, han sido encontradas soluciones exactas para determinadas relaciones entre sus parámetros utilizando métodos variacionales o introduciendo un *ansatz* oportuno que permite transformar la ecuación en un sistema dinámico de dimensión finita (Akhmediev et al., 1996). En particular, si $\delta = 0$ (ganancia lineal nula) el caso *cúbico* ($\mu = \nu = 0$) admite solitones estables de amplitud arbitraria de la forma

$$u_{\text{sol}}^{\text{CGLE3}}(x, t) = \psi(x)e^{i\omega t} \quad (2.17)$$

siendo

$$\psi(x) = \psi(x) = \bar{\psi}(x) \exp [i(\phi_0 + d \ln \bar{\psi}(x))], \quad \bar{\psi}(x) = GF \operatorname{sech}(Gx),$$

con $G > 0$ y

$$\lambda = \sqrt{1 + 4\beta^2}, \quad \omega = \frac{d\lambda^2 G^2}{2\beta}, \quad d = \frac{\lambda - 1}{2\beta}, \quad F = \frac{(2 + 9\beta^2)\lambda(\lambda - 1)}{2\beta^2(3\lambda - 1)}.$$

En la bibliografía también se reportan soluciones analíticas estables de tipo similar para el caso *cúbico–quíntico*, cuyas expresiones son aún más engorrosas (Akhmediev & Ankiewicz, 2008). Sin embargo, la verdadera riqueza y variedad de este modelo ha sido revelada gracias a la experimentación numérica combinada con métodos semianalíticos, mediante los cuales se han encontrado soluciones localizadas de carácter *pulsante*, *explosivo*, *reptante*, *adhesivo* y *caótico* (Akh-

mediev et al., 2001). Para que estas soluciones se manifiesten, es imprescindible la presencia del término cuántico. Tratándose de un modelo disipativo, estas soluciones han sido denominadas *solitones disipativos* y son típicas de sistemas fuera del equilibrio (Akhmediev & Ankiewicz, 2008; Ferreira, 2022). Las investigaciones teóricas y computacionales han anticipado la observación de soluciones de esta clase en experimentos con láseres (Cundiff et al., 2002; Renninger et al., 2008; Grellu & Akhmediev, 2012). Cabe destacar que no es posible observar esta multiplicidad de comportamientos en sistemas hamiltonianos como la NLSE3, contrapunto que será puesto de manifiesto mediante la experimentación numérica de los Capítulos 5 y 6, y permitirá evidenciar las ventajas y desventajas de los métodos numéricos cuya investigación es el objeto central de nuestro trabajo. Los solitones disipativos requieren no solo un equilibrio entre dispersión y no linealidad como en sistemas conservativos tipo NLSE, sino también un balance entre entrada y salida de energía del sistema. Adicionalmente, los solitones de sistemas integrables dependen delicadamente de las condiciones iniciales, mientras que sus análogos disipativos están determinados por los parámetros del sistema y pueden constituirse a partir de distintas condiciones iniciales. Desde el punto de vista de la teoría de sistemas dinámicos, los solitones disipativos constituyen atractores de distinto tipo en un espacio de fase infinito-dimensional (puntos fijos, ciclos límite y atractores extraños estables) a los que converge cualquier estado dentro de la cuenca de atracción asociada, que depende de los valores específicos de los parámetros del sistema (Hirsch et al., 2012; Strogatz, 2018). Por lo tanto, las características de los solitones hallados dependerá de la región del espacio de parámetros del sistema en que nos encontremos (Akhmediev & Ankiewicz, 2008).

2.4. Modelos no locales: variantes fraccionarias

Con el objetivo de contemplar interacciones *no locales* de largo alcance, se han propuesto recientemente generalizaciones de los modelos anteriores en los que el operador Laplaciano actuando sobre un dominio no acotado se sustituye por su variante fraccionaria (Weitzner & Zaslavsky, 2003; Kwaśnicki, 2017)

$$(-\partial_x^2)^{\alpha/2} u(x) := \mathcal{F}^{-1} (|k|^\alpha \mathcal{F}u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} |k|^\alpha \hat{u}(k) e^{ikx} dk, \quad (2.18)$$

siendo $1 < \alpha \leq 2$ el denominado *índice de Lévy*. El símbolo de este operador es, por lo tanto,

$$\mathcal{A}(k) = |k|^\alpha. \quad (2.19)$$

Entre sus aplicaciones, Laskin (2000) ha propuesto una ecuación de Schrödinger fraccionaria (fSE) como modelo para una mecánica cuántica no local. Posteriormente, Longhi (2015) ha sugerido un análogo óptico de dicho modelo. Una implementación experimental parcialmente exitosa del mismo ha sido reportada muy recientemente por Liu et al. (2023).

La ecuación de Schrödinger no lineal cúbica fraccionaria (fNLSE3) que generaliza el modelo 2.7 ha sido estudiada teóricamente por Weitzner & Zaslavsky (2003); Guo & Huang (2012);

Frank & Lenzmann (2013) y numéricamente por Klein et al. (2014); Duo & Zhang (2016); Mao & Shen (2017); Tang et al. (2018).

Análogamente, Qiu et al. (2020) han investigado mediante métodos variacionales y numéricos el comportamiento de solitones disipativos de una ecuación compleja fraccionaria de Ginzburg–Landau con no linealidad cúbico–quintica (fCGLE5) que generaliza la ecuación 2.16, reportando diversas dinámicas en función del grado de no localidad.

Como puede apreciarse a partir de la breve selección realizada entre la vasta literatura disponible, la temática de las ecuaciones de evolución fraccionarias presenta una intensa actividad reciente. Dado que todos los modelos hasta aquí enumerados son casos contemplados dentro del problema general de evolución abstracto 2.1, los mismos serán tratables mediante las técnicas numéricas desarrolladas en el Capítulo 3. En particular, en los Capítulos 5 y 6 contrastaremos los resultados obtenidos por los métodos numéricos investigados en esta tesis con los reportados por Klein et al. (2014) y Qiu et al. (2020) en relación a la fNLSE3 y la fCGLE5, respectivamente. Esperamos de este modo aportar herramientas computacionales eficientes y robustas que complementen las investigaciones en curso.

Capítulo 3

Métodos numéricos

3.1. Descripción general

Los métodos numéricos concebidos para el estudio de las EDP abarcan un campo extensísimo y constituyen uno de los impulsos principales para el desarrollo del análisis numérico. En lo que sigue haremos una somera descripción de algunas de las técnicas involucradas en el desarrollo de los métodos investigados en esta tesis. Una revisión reciente sobre métodos adecuados para problemas de evolución puede encontrarse en [Ascher \(2008\)](#).

Suponiendo establecido el buen planteo de la EDP (esto es, bajo qué condiciones admite una única solución que varía con continuidad respecto de los datos de entrada y los parámetros de la ecuación) y determinadas analíticamente propiedades *a priori* de la solución, el siguiente paso consiste en discretizar el problema original planteado sobre un dominio continuo para obtener una formulación en dimensión finita que sea tratable computacionalmente.

Una técnica de semidiscretización ampliamente utilizada en problemas de evolución es el *método de líneas* ([Hamdi et al., 2007](#)). En este método se aproximan algebraicamente los operadores diferenciales en todas las variables menos una (en general, aquella interpretada como *tiempo* y denominada *variable de valores iniciales*) y la EDP se transforma en un sistema de EDO en el que las incógnitas son los valores de la solución buscada sobre una grilla finita. El correspondiente problema de valores iniciales se resuelve numéricamente mediante un integrador genérico, utilizando –por ejemplo– esquemas de Runge-Kutta explícitos o implícitos ([Ascher & Petzold, 1998](#); [Hairer et al., 1993](#); [Hairer & Wanner, 2010](#); [Butcher, 2016](#)). Para la aproximación de las funciones y de los operadores diferenciales que actúan sobre las variables denominadas *espaciales* o *de valores de frontera* pueden utilizarse diversos métodos, siendo los más usuales el *método de diferencias finitas* ([Morton & Mayers, 2005](#)) y el *método de elementos finitos* ([Johnson, 2012](#)). Otras discretizaciones espaciales son posibles, por ejemplo técnicas sin malla basadas en funciones de base radial ([Fornberg & Flyer, 2015](#)).

En este trabajo utilizamos una variante del método de líneas. En primer lugar, discretizamos los operadores y funciones en la variable espacial mediante el *método pseudoespectral* ([Fornberg, 1996](#); [Trefethen, 2000](#); [Boyd, 2000](#); [Canuto et al., 2007](#); [Hesthaven et al., 2007](#); [Shen et al., 2011](#)), una técnica de aproximación *global* compatible con el carácter posiblemente no local de los ope-

radores pseudodiferenciales involucrados en nuestro problema modelo 2.1. Luego resolvemos el problema de valores iniciales mediante estrategias de descomposición (*splitting*) de operadores, cuyos detalles introducimos en la siguiente sección.

3.2. Métodos de descomposición de operadores (*splitting*)

Los métodos de descomposición o *splitting* de operadores –también conocidos como métodos de descomposición temporal (*time-splitting*), de pasos fraccionarios (*fractional steps*) o de pasos partidos (*split-step*)– son esquemas elaborados para la solución de ecuaciones diferenciales basados en la clásica estrategia de *dividir y vencer* (McLachlan et al., 2002; Borgna et al., 2015).

Consideremos el problema de valores iniciales abstracto

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u &= F(u), \\ u(0) &= u_0 \in \mathcal{H}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

en el que \mathcal{H} es un espacio de funciones oportuno y $F(u)$ un operador (posiblemente no lineal) asociado al problema concreto que se esté resolviendo. Llamamos *flujo* o *propagador* generado por F al mapa $\phi(t, u_0) : \mathbb{R}_0^+ \times \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ definido de tal modo que $u(t) = \phi(t, u_0)$ sea la solución a tiempo t del problema de evolución 3.1 a partir del dato inicial u_0 .

El objetivo de los métodos de descomposición de operadores consiste en aproximar el flujo $\phi(t, u_0)$ y obtener una aproximación a la solución $u(t)$ del problema. Para ello, se expresa el operador F mediante la *descomposición* $F(u) = A(u) + B(u)$ y se determinan de manera exacta o aproximada los flujos $\phi_A(t, u_0)$ y $\phi_B(t, u_0)$ asociados a los problemas de evolución parciales

$$\frac{d}{dt}u = A(u), \quad u(0) = u_0, \tag{3.2}$$

$$\frac{d}{dt}u = B(u), \quad u(0) = u_0. \tag{3.3}$$

Finalmente, se aproxima el flujo $\phi(t, u_0)$ del problema completo 3.1 mediante una adecuada combinación (*síntesis*) de los flujos $\phi_A(t, u_0)$ y $\phi_B(t, u_0)$ que resuelven los problemas parciales 3.2 y 3.3.

La elección de los operadores A y B a partir de F depende del problema estudiado. La descomposición será razonable siempre que los flujos parciales se obtengan de manera más simple o conveniente que el flujo asociado al problema original, y que el precio a pagar en la operación de *síntesis* resulte justificado por los beneficios obtenidos en términos de exactitud, estabilidad y costo computacional. Adicionalmente, suelen contemplarse los siguientes criterios de descomposición (Hundsdorfer & Verwer, 2003; Holden et al., 2010; Glowinski et al., 2017):

- separar operadores que actúan sobre coordenadas espaciales distintas;
- separar operadores correspondientes a fenómenos diferentes como dispersión, convec-

ción, difusión, reacción, etc.;

- separar los términos lineales de los no lineales.

Una descomposición inteligente habilita la aplicación de técnicas de solución especializadas para cada operador, incrementando en muchos casos el rendimiento del método de aproximación con respecto a estrategias que atacan en forma directa el problema completo. Paralelamente, los esquemas basados en descomposición permiten investigar modelos que se construyen *incrementalmente* mediante la inclusión o exclusión de términos que representan diversos tipos de fenómenos en distintas escalas y niveles de complejidad. Esta versatilidad ha hecho de estos métodos una opción crecientemente utilizada desde los trabajos pioneros de Peaceman & Rachford (1955), Douglas & Rachford (1956), Yanenko (1971), Strang (1968) y Marchuk (1968, 1990). Más recientemente, los métodos de descomposición se han consolidado como un ingrediente fundamental para la construcción de *integradores geométricos*, como se denomina a los esquemas de integración diseñados para preservar numéricamente las propiedades estructurales e invariantes que caracterizan la dinámica de muchos fenómenos en campos como mecánica celeste, aceleradores de partículas, dinámica molecular y teoría de control, especialmente cuando es necesario aproximar las soluciones en escalas de tiempo grandes (Sanz-Serna & Calvo, 1994; McLachlan et al., 2002; Leimkuhler & Reich, 2004; Hairer et al., 2006; Blanes et al., 2008; Blanes & Casas, 2017).

En síntesis, la estrategia general de solución del problema de valores iniciales mediante descomposición de operadores requiere

1. determinar los operadores A y B tales que $F(u) = A(u) + B(u)$ con $u \in \mathcal{H}$, atendiendo a las particularidades del problema;
2. resolver los problemas parciales 3.2 y 3.3 para obtener –en forma exacta o aproximada– los propagadores $\phi_A(t, u_0)$ y $\phi_B(t, u_0)$ correspondientes;
3. combinar los propagadores $\phi_A(t, u_0)$ y $\phi_B(t, u_0)$ de manera oportuna para aproximar de la mejor manera posible el flujo $\phi(t, u_0)$ del problema original 3.1.

Los puntos 1 y 2 dependen del problema específico y se encuentran claramente entrelazados, mientras que el tercer aspecto es aquel sobre el que más se ha avanzado en la construcción de una teoría general, como lo refleja la sólida bibliografía existente. La exposición de esta sección se limitará a descomposiciones de dos operadores por razones de simplicidad pero la idea básica es generalizable a tres o más operadores, y en muchos casos esta última alternativa resulta ventajosa para facilitar o hacer más eficiente la resolución de los problemas parciales. Complementariamente, la necesidad de combinar un mayor número de propagadores parciales podría incrementar la complejidad del esquema numérico resultante, lo cual dependerá de la estrategia de síntesis utilizada.

Para ejemplificar la aplicación de estos métodos en un contexto elemental, consideramos el

problema de valores iniciales lineal autónomo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{u} &= \mathbf{F}\mathbf{u} = (\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{u}, \\ \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_0,\end{aligned}\tag{3.4}$$

en el que $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$ es el vector de estado, $\mathbf{u}_0 \in \mathbb{C}^N$ es el estado inicial y $\mathbf{F}, \mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ son matrices tales que \mathbf{A} y \mathbf{B} no necesariamente conmutan. Entonces la solución del problema 3.4 puede expresarse como (Hirsch et al., 2012)

$$\mathbf{u}(t) = e^{t(\mathbf{A}+\mathbf{B})}\mathbf{u}_0 =: \Phi(t)\mathbf{u}_0,\tag{3.5}$$

donde el propagador $\Phi(t)$ es la matriz¹ dada por la serie convergente

$$\Phi(t) := e^{t(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} (\mathbf{A} + \mathbf{B})^n\tag{3.6}$$

$$= \mathbf{I} + t(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \frac{1}{2}t^2(\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{B}^2) + \mathcal{O}(t^3).\tag{3.7}$$

Análogamente, los problemas parciales

$$\frac{d}{dt}\mathbf{u} = \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0,\tag{3.8}$$

$$\frac{d}{dt}\mathbf{u} = \mathbf{B}\mathbf{u}, \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0,\tag{3.9}$$

admiten las respectivas soluciones

$$\mathbf{u}(t) = \Phi_A(t)\mathbf{u}_0 = e^{t\mathbf{A}}\mathbf{u}_0,\tag{3.10}$$

$$\mathbf{u}(t) = \Phi_B(t)\mathbf{u}_0 = e^{t\mathbf{B}}\mathbf{u}_0,\tag{3.11}$$

dadas por los propagadores

$$\Phi_A(t) := e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{I} + t\mathbf{A} + \frac{1}{2!}t^2\mathbf{A}^2 + \frac{1}{3!}t^3\mathbf{A}^3 + \mathcal{O}(t^4),\tag{3.12}$$

$$\Phi_B(t) := e^{t\mathbf{B}} = \mathbf{I} + t\mathbf{B} + \frac{1}{2!}t^2\mathbf{B}^2 + \frac{1}{3!}t^3\mathbf{B}^3 + \mathcal{O}(t^4).\tag{3.13}$$

La *fórmula de Lie*² (ver Teorema 16.15 en Hall (2013))

$$e^{t(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{t}{n}\mathbf{A}} e^{\frac{t}{n}\mathbf{B}} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{t}{n}\mathbf{B}} e^{\frac{t}{n}\mathbf{A}} \right)^n$$

sugiere un método para aproximar el propagador $\Phi(t)$ a partir de $\Phi_A(t)$ y $\Phi_B(t)$. En efecto,

¹Notar que en este ejemplo matricial llamamos $\Phi(t)$ a la matriz del propagador mientras que reservamos el símbolo $\phi(t, u_0)$ para el propagador en el caso general.

²También denominada *fórmula de Lie–Trotter*, en referencia a la generalización introducida por Trotter (1959) para el caso de operadores no acotados en espacios de Hilbert. Para mayores detalles, ver Teorema 20.1 en Hall (2013).

para n suficientemente grande debe ser

$$\Phi(t) \approx (\Phi_A(t/n)\Phi_B(t/n))^n \approx (\Phi_B(t/n)\Phi_A(t/n))^n,$$

o equivalentemente

$$\Phi(h) \approx \Phi_A(h)\Phi_B(h) \approx \Phi_B(h)\Phi_A(h),$$

con $h = t/n \ll 1$. Por lo tanto, las expresiones 3.12 y 3.13 permiten construir el siguiente par adjunto³ de aproximaciones de Lie–Trotter del propagador $\Phi(h)$

$$\Phi_1^+(h) := \Phi_A(h)\Phi_B(h) = \mathbf{I} + h(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \frac{1}{2}h^2(\mathbf{A}^2 + 2\mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{B}^2) + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.14)$$

$$\Phi_1^-(h) := \Phi_B(h)\Phi_A(h) = \mathbf{I} + h(\mathbf{B} + \mathbf{A}) + \frac{1}{2}h^2(\mathbf{A}^2 + 2\mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{B}^2) + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.15)$$

El *error* de la aproximación, definido como la diferencia entre el flujo exacto 3.6 y sus aproximaciones 3.14–3.15, resulta entonces

$$\begin{aligned} e_{AB}(h) &:= \Phi(h) - \Phi_A(h)\Phi_B(h) \\ &= \frac{1}{2}h^2(\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}) + \mathcal{O}(h^3) = \frac{1}{2}h^2[\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned} \quad (3.16)$$

siendo $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}$ el *conmutador* o *corchete de Lie* de las matrices \mathbf{A}, \mathbf{B} . De forma similar

$$e_{BA}(h) := \Phi(h) - \Phi_B(h)\Phi_A(h) = \frac{1}{2}h^2[\mathbf{B}, \mathbf{A}] + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.17)$$

Las ecuaciones 3.16 y 3.17 muestran que los propagadores de Lie–Trotter $\Phi_1^\pm(h)$ son aproximaciones de *primer orden* ya que coinciden con el flujo exacto $\Phi(h)$ hasta el término lineal en h . De forma general, las expresiones 3.14 y 3.15 para matrices $h\mathbf{A}$ y $h\mathbf{B}$ suficientemente pequeñas pueden escribirse mediante la *fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff* (BCH)

$$e^{h\mathbf{A}}e^{h\mathbf{B}} = e^{h(\mathbf{A}+\mathbf{B}) + \frac{1}{2}h^2[\mathbf{A},\mathbf{B}] + \frac{1}{12}h^3[\mathbf{A},[\mathbf{A},\mathbf{B}]] - \frac{1}{12}h^3[\mathbf{B},[\mathbf{A},\mathbf{B}]] - \frac{1}{24}h^4[\mathbf{B},[\mathbf{A},[\mathbf{A},\mathbf{B}]]] + \dots}, \quad (3.18)$$

donde los puntos suspensivos denotan términos en potencias superiores de h que contienen *conmutadores iterados* de \mathbf{A} y \mathbf{B} y coeficientes independientes de dichas matrices (Hall, 2013).

Para aumentar el orden de convergencia de estas aproximaciones exploramos dos alternativas que anticipan los esquemas a desarrollar en las secciones subsiguientes. En primer lugar, dado que los términos principales de los errores 3.16 y 3.17 son opuestos⁴, es posible cancelarlos y obtener un método de orden 2 mediante una estrategia *aditiva*. Concretamente, simetrizando los propagadores de Lie–Trotter 3.14 y 3.15 se obtiene un método *aditivo simétrico de segundo*

³En el contexto matricial considerado, $\Phi^*(h)$ se denomina *adjunto* del método $\Phi(h)$ si y sólo si $\Phi^*(h)\Phi(-h) = \mathbf{I}$. Más generalmente, se dice que el método $\Phi^*(h, u)$ es adjunto del método $\Phi(h, u)$ si y sólo si $\Phi^*(h, \Phi(-h, u_0)) = u_0$. Un método es *simétrico* si coincide con su adjunto. Mayores detalles pueden encontrarse en el Capítulo II.3 de Hairer et al. (2006).

⁴Se trata de una propiedad general de los métodos *adjuntos*, ver Teorema 3.2 de Hairer et al. (2006).

orden

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{AS2}}(h) &:= \frac{1}{2} (\Phi_A(h)\Phi_B(h) + \Phi_B(h)\Phi_A(h)) = \frac{1}{2} (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) \\ &= \mathbf{I} + h(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \frac{1}{2}h^2(\mathbf{A}^2 + \mathbf{AB} + \mathbf{BA} + \mathbf{B}^2) + \mathcal{O}(h^3),\end{aligned}\quad (3.19)$$

ya que su desarrollo coincide con el del propagador exacto $\Phi(h)$ dado por 3.6 hasta el término que contiene h^2 . Esquemas aditivos de este clase y sus generalizaciones, que analizaremos en la Subsección 3.2.2, son nuestro principal objeto de estudio.

Alternativamente, el siguiente esquema *multiplicativo* basado en el producto de esquemas adjuntos de Lie–Trotter evaluados en $h/2$ también conduce a una aproximación de segundo orden, como puede comprobarse realizando el correspondiente desarrollo en potencias de h (que omitimos por brevedad)

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{MS2}}(h) &:= \Phi_1^+\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_1^-\left(\frac{1}{2}h\right) \\ &= \Phi_A\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_B\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_B\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_A\left(\frac{1}{2}h\right) \\ &= \Phi_A\left(\frac{1}{2}h\right)\Phi_B(h)\Phi_A\left(\frac{1}{2}h\right) = \Phi(h) + \mathcal{O}(h^3).\end{aligned}$$

Este esquema es conocido como *método de Strang–Marchuk* (Strang, 1968; Marchuk, 1968, 1990) y es probablemente el más utilizado entre los métodos de descomposición de operadores, integrando la familia de los integradores geométricos *simplécticos* según mostraremos más adelante (Sanz-Serna & Calvo, 1994; Hairer et al., 2006; Blanes & Casas, 2017).

En lo sucesivo, profundizaremos en las siguientes cuestiones:

1. de qué maneras pueden generalizarse las dos estrategias elementales recién expuestas con objeto de construir esquemas *multiplicativos* y *aditivos* de orden de convergencia superior para aproximar el flujo $\phi(h, u_0)$ del problema de evolución 3.1;
2. qué ventajas, limitaciones y méritos relativos poseen estas generalizaciones;
3. qué técnicas de optimización admiten los dos clases de esquemas para incrementar su eficiencia y versatilidad, y cuán accesible o compleja es su implementación;
4. de qué manera es posible aplicar los métodos de descomposición resultantes al caso de operadores lineales y no lineales en espacios de dimensión infinita, esto es, en la solución de EDP.

Expondremos en primer lugar algunas estrategias de descomposición multiplicativas conocidas y ampliamente utilizadas, para luego presentar una familia de esquemas aditivos recientemente introducidos y cuya investigación es el objeto principal de este trabajo.

3.2.1. Esquemas multiplicativos: sistemas hamiltonianos y métodos simplécticos

Los métodos de Lie–Trotter (orden 1) y Strang–Marchuk (orden 2) son los ejemplos más elementales de esquemas multiplicativos para aproximar la solución de ecuaciones de evolución mediante la técnica de descomposición de operadores. En el contexto de problemas hamiltonianos, poseen interesantes propiedades de preservación de invariantes de la dinámica y por ello forman parte de los denominados *integradores geométricos*. El interés en este tipo de métodos a partir de la década de 1980 se encuentra vinculado a la búsqueda de integradores adecuados para problemas de mecánica celeste, aceleradores de partículas y dinámica molecular, en los cuales es importante conservar numéricamente las constantes de movimiento de la dinámica en tiempos de integración largos. A partir de los años '90 del siglo pasado la integración geométrica se consolida como un tema de investigación de relevancia dentro de la matemática aplicada, manteniendo su vigencia hasta nuestros días. Referencias recientes incluyendo aplicaciones son [Sanz-Serna & Calvo \(1994\)](#), [Leimkuhler & Reich \(2004\)](#), [Hairer et al. \(2006\)](#) y [Blanes & Casas \(2017\)](#). A continuación revisamos las nociones principales relacionadas con sistemas dinámicos hamiltonianos.

Sistemas hamiltonianos. Un sistema dinámico se denomina *hamiltoniano* si puede expresarse mediante las denominadas *ecuaciones canónicas* o *ecuaciones de Hamilton*

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \nabla_{\mathbf{p}} H, \quad (3.20)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = -\nabla_{\mathbf{q}} H, \quad (3.21)$$

siendo $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_N)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^N$ los vectores de *coordenadas y momentos generalizados*, y $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \in \mathbb{R}$ la *función de Hamilton* o *Hamiltoniano* ([Gantmacher, 1980](#); [Arnol'd, 1989](#); [Goldstein et al., 2002](#)). El conjunto de todos los puntos (\mathbf{q}, \mathbf{p}) admisibles se denomina *espacio de fases* del sistema. Definiendo el vector de estado $\mathbf{u} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^T \in \mathbb{R}^{2N}$ e introduciendo la *matriz simpléctica canónica*

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_N & \mathbf{I}_N \\ -\mathbf{I}_N & \mathbf{0}_N \end{bmatrix},$$

en la que \mathbf{I}_N es la matriz identidad de $N \times N$ y $\mathbf{0}_N$ es la matriz nula, podemos escribir el sistema como

$$\dot{\mathbf{u}} = F(\mathbf{u}) = \mathbf{J} \nabla_{\mathbf{u}} H(\mathbf{u}), \quad (3.22)$$

Si H no depende explícitamente del tiempo, el sistema es *autónomo* y las ecuaciones 3.20 y 3.21 implican

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \dot{\mathbf{p}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial t} = 0,$$

por lo que H es una *constante del movimiento*. Por otra parte, la divergencia del campo vectorial $\dot{\mathbf{u}}$ es

$$\nabla_{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_j} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q_j} \right) = 0, \quad (3.23)$$

y por lo tanto todo conjunto de puntos del espacio de fases se mueve como un fluido incompresible, conservando su volumen en la evolución. En última instancia, todo sistema hamiltoniano está caracterizado por la existencia del *invariante integral de Poincaré* o *área simpléctica* (Gantmacher, 1980)

$$I_1 = \sum_{j=1}^N \oint_{\gamma} p_j dq_j,$$

siendo γ una curva cerrada cualquiera en el espacio de fases. Se cumple que $\frac{d}{dt} I_1 = 0$, siempre y cuando los puntos de la curva γ evolucionen de acuerdo con 3.22.

Si consideramos un Hamiltoniano *separable*⁵

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}), \quad (3.24)$$

el sistema dinámico correspondiente puede escribirse como

$$\dot{\mathbf{u}} = F(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} +\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{u}) \\ -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix} = A(\mathbf{u}) + B(\mathbf{u}), \quad (3.25)$$

donde hemos descompuesto el lado derecho como la suma de los operadores definidos por

$$A(\mathbf{u}) := \begin{bmatrix} +\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

$$B(\mathbf{u}) := \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix}.$$

Los problemas parciales asociados a cada operador resultan

$$\dot{\mathbf{u}} = A(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} +\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{u}) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_0 \\ \mathbf{p}_0 \end{bmatrix},$$

$$\dot{\mathbf{u}} = B(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{u}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0,$$

⁵Esta forma es habitual en problemas de mecánica.

cuyos flujos son, respectivamente

$$\phi_A(h, \mathbf{u}_0) = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_0 + h \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_0) \\ \mathbf{p}_0 \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

$$\phi_B(h, \mathbf{u}_0) = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_0 \\ \mathbf{p}_0 - h \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}_0) \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Se comprueba inmediatamente que estos últimos se obtienen a partir de los Hamiltonianos parciales $H_A = T(\mathbf{p})$ y $H_B = V(\mathbf{q})$ y por lo tanto son también *flujos hamiltonianos*. Los flujos hamiltonianos son casos particulares de *transformaciones canónicas* o *simplécticas* y forman un grupo continuo en el espacio de fases bajo la operación de composición (Lanzos, 1970; Gantmacher, 1980; Arnol'd, 1989; Goldstein et al., 2002). En particular, cualquier composición de 3.26 y 3.27, entre ellas los esquemas de Lie–Trotter y Strang–Marchuk, es a su vez un flujo hamiltoniano y puede derivarse de alguna función $\tilde{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ cuyo valor es *invariante* a lo largo de la trayectoria, aunque diferente en general al de la función $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ que genera el flujo asociado al problema original 3.25. Bajo adecuadas condiciones, resulta $\tilde{H} \rightarrow H$ cuando $h \rightarrow 0$ (Sanz-Serna & Calvo, 1994; Leimkuhler & Reich, 2004; Hairer et al., 2006). Esto significa que los métodos de Lie–Trotter y Strang–Marchuk, así como otros métodos basados en composiciones que analizaremos en lo sucesivo, preservan el hamiltoniano de un *problema modificado* cuyo valor se aproxima al del problema original a medida que el tamaño de paso $h \rightarrow 0$. Sin embargo, para que esta propiedad sea válida el tamaño de paso *debe mantenerse constante* a lo largo de la evolución, condición que no se cumple cuando se utilizan esquemas adaptativos de paso variable (Calvo & Sanz-Serna, 1993).

Para poner de manifiesto en términos más concretos algunas de estas propiedades, incluimos a continuación un ejemplo de un sistema hamiltoniano elemental.

Ejemplo. Sea el Hamiltoniano separable cuadrático del *oscilador armónico simple unidimensional*

$$H(q, p) = \frac{1}{2} (p^2 + q^2).$$

El sistema dinámico correspondiente es

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = p, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -q, \end{aligned}$$

que en forma matricial puede escribirse como

$$\dot{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} +\frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial q} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{u} = \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \right) \mathbf{u}, \quad (3.28)$$

con $\mathbf{u} = (q, p)^T$. La descomposición de 3.28 conduce a los flujos parciales lineales

$$\phi_A(h, \mathbf{u}_n) = \begin{bmatrix} q_n + hp_n \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & +h \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

$$\phi_B(h, \mathbf{u}_n) = \begin{bmatrix} q_n \\ p_n - hq_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}, \quad (3.30)$$

y las aproximaciones de Lie–Trotter adjuntas resultan

$$\mathbf{u}_{n+1} = \Phi_1^+(h, \mathbf{u}_n) = \phi_A(h, \phi_B(h, \mathbf{u}_n)) = \begin{bmatrix} 1 & +h \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - h^2 & +h \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}, \quad (3.31)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \Phi_1^-(h, \mathbf{u}_n) = \phi_B(h, \phi_A(h, \mathbf{u}_n)) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & +h \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & +h \\ -h & 1 - h^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Dado que las matrices del lado derecho tienen determinante igual a uno, los propagadores 3.31 y 3.32 conservan *exactamente* el área de cualquier conjunto del espacio de fases, en concordancia con la propiedad 3.23 del flujo exacto. Por otra parte, tras algunas manipulaciones algebraicas puede verificarse que dichos métodos satisfacen la propiedad

$$p_{n+1}^2 - hq_{n+1}p_{n+1} + q_{n+1}^2 = p_n^2 - hq_n p_n + q_n^2,$$

por lo que ambos conservan el Hamiltoniano *modificado*

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(p^2 - hpq + q^2),$$

tal que $\tilde{H} \rightarrow H$ cuando $h \rightarrow 0$. Manipulaciones análogas para el esquema de Strang–Marchuk, que omitimos, conducen a conclusiones similares.

Esquema multiplicativo general. Los esquemas multiplicativos para descomposiciones en dos operadores admiten la forma general

$$\Phi_M(h) = \Phi_B(b_s h) \Phi_A(a_s h) \cdots \Phi_B(b_2 h) \Phi_A(a_2 h) \Phi_B(b_1 h) \Phi_A(a_1 h) \quad (3.33)$$

bajo la condición $a_1 + a_2 + \cdots + a_s = b_1 + b_2 + \cdots + b_s = 1$, siendo s el número de *etapas* del esquema. Eligiendo adecuadamente los coeficientes a_i y b_i pueden obtenerse métodos multiplicativos de cualquier orden. Para ello es necesario que el producto de operadores del desarrollo 3.33 coincida hasta el orden deseado con el desarrollo de $\Phi(h) = \exp(h(\mathbf{A} + \mathbf{B}))$, condición que conduce a un sistema de ecuaciones *polinomiales* en los coeficientes a_i y b_i cuya complejidad crece rápidamente con el orden (Sanz-Serna & Calvo, 1994; Hairer et al., 2006; Blanes & Casas, 2017). Por otra parte, fijar el orden de convergencia no determina unívocamente el valor

de los coeficientes, pudiendo existir varias soluciones posibles, por lo que deben imponerse criterios adicionales para seleccionar algún conjunto particular de soluciones (por ejemplo, minimizar el número de etapas s , exigir que los coeficientes sean reales, minimizar el error local, etc.).

En este formalismo, los coeficientes de los métodos de Lie–Trotter y Strang–Marchuk son

$$\begin{aligned} \text{Lie – Trotter } (s = 1) : \quad & a_1 = b_1 = 1, \\ \text{Strang – Marchuk } (s = 2) : \quad & a_1 = a_2 = \frac{1}{2}, b_1 = 1, b_2 = 0. \end{aligned}$$

La búsqueda de integradores geométricos de orden superior, iniciada en la comunidad de física de aceleradores de partículas, dio lugar al trabajo pionero de [Ruth \(1983\)](#), en el que se propone un esquema multiplicativo de orden 3 cuyos coeficientes son

$$b_3 = \frac{7}{24}, a_3 = \frac{2}{3}, b_2 = \frac{3}{4}, a_2 = -\frac{2}{3}, b_1 = -\frac{1}{24}, a_1 = 1.$$

Posteriormente [Neri \(1987\)](#) propone el siguiente conjunto de coeficientes para un método simpléctico de orden 4⁶

$$a_1 = a_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, a_2 = a_3 = -\frac{2^{1/3} - 1}{2(2 - 2^{1/3})}, b_1 = b_3 = 2a_1, b_2 = -2^{1/3}b_1, b_4 = 0.$$

[Yoshida \(1990\)](#) advierte que la estrategia de igualar coeficientes del desarrollo del producto se vuelve rápidamente inviable y desarrolla una técnica sistemática para construir integradores multiplicativos (simplécticos) de orden par arbitrario. La técnica es inductiva y a partir de un método multiplicativo $\Phi_{M,2n}$ de orden $2n$ permite construir otro de orden $2n + 2$ de la forma

$$\Phi_{M,2n+2}(h) = \Phi_{M,2n}(z_1 h) \Phi_{M,2n}(z_0 h) \Phi_{M,2n}(z_1 h)$$

siempre que los coeficientes z_0, z_1 cumplan

$$\begin{aligned} z_0 + 2z_1 &= 1, \\ z_0^{2n+1} + 2z_1^{2n+1} &= 0. \end{aligned}$$

Sin embargo, los integradores de orden $2n$ contruidos mediante esta técnica no son los más económicos ya que requieren la evaluación de $3^{n-1} + 1$ integradores de segundo orden. Por lo tanto, en el mismo trabajo se presentan integradores de orden 6 con 8 etapas y de orden 8 con 16 etapas contruidos mediante una técnica alternativa. En particular, Yoshida obtiene un método de orden 6 con los coeficientes indicados en el Cuadro 3.1. En términos generales, *el número de etapas de los esquemas multiplicativos crece rápidamente con el orden del método* y los de orden elevado resultan computacionalmente muy costosos.

⁶Curiosamente, esta referencia es un reporte interno no publicado pero ampliamente citado en trabajos de la época y posteriores. Una referencia alternativa sobre un integrador de orden 4 es [Forest & Ruth \(1990\)](#). Para un recuento histórico, ver [Forest \(2006\)](#).

i	a_i	b_i
1	0.392256805238778632	0.784513610477557264
2	0.510043411918457699	0.235573213359358134
3	-0.471053385409756437	-1.177679984178871007
4	0.068753168252520106	1.315186320683911218
5	0.068753168252520106	-1.177679984178871007
6	-0.471053385409756437	0.235573213359358134
7	0.510043411918457699	0.784513610477557264
8	0.392256805238778632	0.000000000000000000

Cuadro 3.1: Coeficientes del método multiplicativo de Yoshida de orden 6.

Puede notarse que los esquemas de Ruth (orden 3), Neri (orden 4) y Yoshida (orden 6) contienen al menos un a_i y un b_i *negativos*. Como se muestra en [Goldman & Kaper \(1996\)](#) y [Blanes & Casas \(2005\)](#), no se trata de una característica accidental de estos métodos específicos sino de una propiedad de todos los esquemas multiplicativos de orden superior a dos. Este hecho no constituye una dificultad para el tipo de sistemas reversibles y hamiltonianos que originalmente motivaron su desarrollo, pero el requerimiento de etapas con *pasos negativos para ambos propagadores* limita severamente su aplicabilidad cuando se resuelven problemas *irreversibles* ya que estos resultan *mal planteados* y conducen a potenciales *inestabilidades numéricas*. Cabe aclarar que este problema no es evitable eligiendo inteligentemente la descomposición porque *ambos* propagadores serán evaluados eventualmente con pasos negativos. Ejemplos de problemas de evolución irreversibles y de gran importancia por sus aplicaciones son ecuaciones de difusión, difusión–reacción y modelos disipativos más generales como las ecuaciones complejas de Ginzburg–Landau investigadas en esta tesis. Si bien es cierto que en trabajos recientes [Cervi & Spiteri \(2018, 2019\)](#) dan cuenta del comportamiento numéricamente estable de esquemas multiplicativos de orden 3 y 4 en problemas de difusión–reacción específicos, el análisis de estos autores no es inmediatamente extrapolable a problemas más generales del mismo tipo, sino que debe aplicarse caso por caso. También se han propuesto métodos con coeficientes complejos con parte real positiva para superar esta limitación ([Chambers, 2003](#); [Castella et al., 2009](#); [Hansen & Ostermann, 2009](#); [Blanes et al., 2010](#)). Sin embargo, como se ha indicado en [De Leo et al. \(2016\)](#), no son adecuados para problemas pseudodiferenciales generales con operadores fraccionarios (no locales) como los estudiados en este trabajo, además de poseer las demás dificultades de los esquemas multiplicativos (condiciones de orden polinomiales, crecimiento exponencial de etapas con el orden, etc.).

Para finalizar, destacamos el completo y muy útil catálogo de coeficientes de métodos multiplicativos realizado por [Auzinger & Koch \(2023\)](#), que incluye los métodos más recientes y en el que se referencian los trabajos originales. Además de los esquemas multiplicativos recién descritos y que analizaremos en el Capítulo 5, este catálogo incluye métodos adaptativos recientemente publicados y a los que recurriremos con fines comparativos en el Capítulo 6.

3.2.2. Esquemas aditivos: métodos afines

Con el objetivo de obtener métodos de descomposición de alto orden que eviten el requerimiento de pasos negativos, [De Leo et al. \(2016\)](#) introdujeron esquemas basados en combinaciones afines de propagadores de Lie–Trotter construidos por extrapolación que solo requieren pasos positivos. De esta forma, resultan aplicables a problemas tanto reversibles como irreversibles. Las propiedades de estos métodos constituyen el foco de nuestra investigación.

Para comprender la estrategia propuesta para su construcción, en lo que sigue desarrollamos las ideas en el contexto de un problema matricial para facilitar la exposición y mostramos algunos ejemplos concretos antes de presentar el resultado general. Recordemos la definición de los esquemas de Lie–Trotter adjuntos ya presentados

$$\Phi_1^+(h) = \Phi_A(h)\Phi_B(h), \quad (3.34)$$

$$\Phi_1^-(h) = \Phi_B(h)\Phi_A(h), \quad (3.35)$$

donde Φ_A y Φ_B son los propagadores [3.12](#) que resuelven los problemas lineales autónomos parciales [3.8](#) y [3.9](#), respectivamente. Los esquemas $\Phi_1^\pm(h)$ son aproximaciones de primer orden a $\Phi(h)$, esto es

$$\Phi(h) = \Phi_1^\pm(h) + C_2h^2 + C_3h^3 + C_4h^4 + \mathcal{O}(h^5), \quad (3.36)$$

donde las matrices C_i dependen exclusivamente de \mathbf{A} y \mathbf{B} pero no del tamaño de paso h . Para aumentar el orden de convergencia de estos métodos puede aplicarse la clásica pero poderosa técnica de *extrapolación de Richardson* ([Richardson, 1911](#); [Richardson & Gaunt, 1927](#); [Press et al., 2007](#)). Para ello, podemos aproximar el propagador $\Phi(h)$ realizando *dos pasos del propagador* $\Phi_1^\pm(h/2)$. Considerando que el error en dos pasos es aproximadamente el doble del error en un solo paso, mejorando dicha estimación en forma asintótica a medida que $h \rightarrow 0$ ([Hairer et al., 1993](#)), podemos escribir la siguiente aproximación de primer orden *mejorada*

$$\Phi(h) \approx \Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right) + 2C_2\frac{h^2}{2^2} + 2C_3\frac{h^3}{2^3} + 2C_4\frac{h^4}{2^4} + \mathcal{O}(h^5). \quad (3.37)$$

La idea básica de la técnica de extrapolación consiste en eliminar el término del error que depende de h^2 mediante una combinación lineal adecuada de las ecuaciones [3.36](#) y [3.37](#), incrementando en consecuencia el orden de la aproximación. Multiplicando por γ_1 y γ_2 las ecuaciones [3.36](#) y [3.37](#) y sumando, obtenemos

$$(\gamma_1 + \gamma_2)\Phi(h) = \gamma_1\Phi_1^\pm(h) + \gamma_2\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right) + \left(\gamma_1 + \frac{1}{2}\gamma_2\right)C_2h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

La expresión anterior es una aproximación a $\Phi(h)$ de orden (asintótico) 2 si los coeficientes

verifican

$$\begin{aligned}\gamma_1 + \gamma_2 &= 1, \\ \gamma_1 + \frac{1}{2}\gamma_2 &= 0.\end{aligned}$$

El problema tiene la única solución $\gamma_1 = -1, \gamma_2 = 2$ y el esquema resultante es el *afín asimétrico de orden 2* (AA2)

$$\Phi_{AA2}^\pm(h) = (-1)\Phi_1^\pm(h) + 2\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right).$$

Repitiendo el argumento, realizando tres pasos de $\Phi_1^\pm(h/3)$ se obtiene

$$\Phi(h) \approx \Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right) + 3C_2\frac{h^2}{3^2} + 3C_3\frac{h^3}{3^3} + \mathcal{O}(h^4). \quad (3.38)$$

Combinando linealmente las ecuaciones 3.36, 3.37 y 3.38 se llega a

$$\begin{aligned}(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3)\Phi(h) &= \gamma_1\Phi_1^\pm(h) + \gamma_2\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right) + \gamma_3\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right) \\ &+ \left(\gamma_1 + \frac{1}{2}\gamma_2 + \frac{1}{3}\gamma_3\right)C_2h^2 + \left(\gamma_1 + \frac{1}{2^2}\gamma_2 + \frac{1}{3^2}\gamma_3\right)C_3h^3 + \mathcal{O}(h^4).\end{aligned}$$

Para aproximar $\Phi(h)$ con orden (asintótico) 3 el lado izquierdo debe ser $\Phi(h)$ y deben anularse los términos en h^2 y h^3 , lo que conduce al sistema lineal

$$\begin{aligned}\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 &= 1, \\ \gamma_1 + \frac{1}{2}\gamma_2 + \frac{1}{3}\gamma_3 &= 0, \\ \gamma_1 + \frac{1}{2^2}\gamma_2 + \frac{1}{3^2}\gamma_3 &= 0,\end{aligned}$$

cuya solución permite escribir el siguiente esquema *afín asimétrico de orden 3* (AA3)

$$\Phi_{AA3}^\pm(h) = \frac{1}{2}\Phi_1^\pm(h) - 4\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{9}{2}\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^\pm\left(\frac{h}{3}\right).$$

Generalizando el argumento por inducción resulta que un esquema de la forma

$$\Phi_{AAq}^\pm(h) = \sum_{m=1}^q \gamma_m \Phi_m^\pm(h/m), \quad (3.39)$$

con $\Phi_m^\pm(h) = \Phi_{m-1}^\pm(h)\Phi_1^\pm(h)$, es una aproximación de orden q a $\Phi(h)$ si los γ_m satisfacen las *condiciones de consistencia y orden*

$$\sum_{m=1}^q \gamma_m = 1, \quad (3.40)$$

$$\sum_{m=1}^q \frac{\gamma_m}{m^k} = 0, \quad k = 1, \dots, q-1. \quad (3.41)$$

Debido a la condición 3.40, los métodos obtenidos son *combinaciones afines* de composiciones de esquemas de Lie–Trotter, por lo que serán denominados *métodos afines de descomposición*. En particular, llamaremos *métodos afines asimétricos* a los de la forma 3.39.

La misma idea puede implementarse a partir de simetrizaciones de los métodos anteriores, teniendo en cuenta que el error de los esquemas simétricos consta únicamente de términos con potencias *impares* de h debido a que los métodos adjuntos de Lie–Trotter definidos en 3.14 y 3.15 satisfacen⁷

$$\begin{aligned}\Phi(h) &= \Phi_1^+(h) + C_2h^2 + C_3h^3 + C_4h^4 + C_5h^5 + \mathcal{O}(h^6), \\ \Phi(h) &= \Phi_1^-(h) - C_2h^2 + C_3h^3 - C_4h^4 + C_5h^5 + \mathcal{O}(h^6).\end{aligned}$$

En particular, las expresiones del término principal del error dadas por 3.16 y 3.17 muestran que $C_2 = 1/2 [A, B]$. Calculando la semisuma de estas expresiones obtenemos la aproximación para el método aditivo simétrico de orden 2 ya presentado

$$\Phi(h) = \frac{1}{2} (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) + C_3h^3 + C_5h^5 + \mathcal{O}(h^7). \quad (3.42)$$

Si realizamos dos pasos de tamaño $h/2$ con cada propagador de Lie–Trotter, resultan las aproximaciones (asintóticamente correctas para $h \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned}\Phi(h) &\approx \Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right) + 2C_2\frac{h^2}{2^2} + 2C_3\frac{h^3}{2^3} + 2C_4\frac{h^4}{2^4} + 2C_5\frac{h^5}{2^5} + \mathcal{O}(h^6), \\ \Phi(h) &\approx \Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right) - 2C_2\frac{h^2}{2^2} + 2C_3\frac{h^3}{2^3} - 2C_4\frac{h^4}{2^4} + 2C_5\frac{h^5}{2^5} - \mathcal{O}(h^6).\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\Phi(h) \approx \frac{1}{2} \left(\Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right) + \Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right)\Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right) \right) \quad (3.43)$$

$$+ C_3\frac{h^3}{2^2} + C_5\frac{h^5}{2^4} + \mathcal{O}(h^7). \quad (3.44)$$

Análogamente, para tres pasos de tamaño $h/3$ tenemos

$$\Phi(h) \approx \frac{1}{2} \left(\Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right) + \Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right)\Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right) \right) \quad (3.45)$$

$$+ C_3\frac{h^3}{3^2} + C_5\frac{h^5}{3^4} + \mathcal{O}(h^7). \quad (3.46)$$

Combinando linealmente estas aproximaciones de segundo orden ponderadas por los pesos

⁷Este resultado se deriva de la fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff, teniendo en cuenta su estructura de conmutadores anidados, junto con las propiedades de linealidad y anticonmutatividad del corchete de Lie.

γ_m resulta

$$\begin{aligned}
2(\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3) \Phi(h) &= \gamma_1 (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) \\
&+ \gamma_2 \left(\Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right) \Phi_1^+\left(\frac{h}{2}\right) + \Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right) \Phi_1^-\left(\frac{h}{2}\right) \right) \\
&+ \gamma_3 \left(\Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right) \Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right) \Phi_1^+\left(\frac{h}{3}\right) + \Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right) \Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right) \Phi_1^-\left(\frac{h}{3}\right) \right) \\
&+ 2 \left(\gamma_1 + \frac{\gamma_2}{2^2} + \frac{\gamma_3}{3^2} \right) C_3 h^3 + 2 \left(\gamma_1 + \frac{\gamma_2}{2^4} + \frac{\gamma_3}{3^4} \right) C_5 h^5 + \mathcal{O}(h^7).
\end{aligned}$$

Si los γ_m satisfacen

$$\begin{aligned}
\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 &= \frac{1}{2}, \\
\gamma_1 + \frac{\gamma_2}{2^2} + \frac{\gamma_3}{3^2} &= 0, \\
\gamma_1 + \frac{\gamma_2}{2^4} + \frac{\gamma_3}{3^4} &= 0,
\end{aligned}$$

conseguimos el siguiente método *afín simétrico de orden 6* (AS6)

$$\begin{aligned}
\Phi_{\text{AS6}}(h) &= + \frac{1}{48} (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) \\
&- \frac{8}{15} (\Phi_1^+(h/2) \Phi_1^+(h/2) + \Phi_1^-(h/2) \Phi_1^-(h/2)) \\
&+ \frac{81}{80} (\Phi_1^+(h/3) \Phi_1^+(h/3) \Phi_1^+(h/3) + \Phi_1^-(h/3) \Phi_1^-(h/3) \Phi_1^-(h/3)).
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Generalizando inductivamente, se logra un *método afín simétrico* de orden $q = 2s$ de la forma

$$\Phi_{\text{AS}q}(h) = \sum_{m=1}^s \gamma_m (\Phi_m^+(h/m) + \Phi_m^-(h/m)), \tag{3.48}$$

con $\Phi_m^\pm(h) = \Phi_{m-1}^\pm(h) \Phi_1^\pm(h)$, si los γ_m satisfacen

$$\sum_{m=1}^s \gamma_m = \frac{1}{2}, \tag{3.49}$$

$$\sum_{m=1}^s \frac{\gamma_m}{m^{2k}} = 0, \quad k = 1, \dots, s-1. \tag{3.50}$$

Con fines de referencia, en el Cuadro 3.2 se muestran los coeficientes γ_m que resultan de resolver las condiciones de orden 3.40, 3.41, 3.49 y 3.50 para métodos afines asimétricos de orden 2, 3 y 4, y simétricos de orden 2, 4, 6 y 8.

	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4
AA2	-1	2	—	—
AA3	1/2	-4	9/2	—
AA4	-1/6	4	-27/2	32/3
AS2	1/2	—	—	—
AS4	-1/6	2/3	—	—
AS6	1/48	-8/15	81/80	—
AS8	-1/720	8/45	-729/560	512/315

Cuadro 3.2: Coeficientes de métodos afines. La notación 'AA' denota un método aditivo asimétrico, mientras que 'AS' se refiere a un método simétrico. El número indica el orden del método.

Ejemplo. Métodos afines asimétricos de orden 3.

$$\begin{aligned}\Phi_{AA3}^{\pm}(h) = & + \frac{1}{2} \Phi_1^{\pm}(h) \\ & - 4 \Phi_1^{\pm}(h/2) \Phi_1^{\pm}(h/2) \\ & + \frac{9}{2} \Phi_1^{\pm}(h/3) \Phi_1^{\pm}(h/3) \Phi_1^{\pm}(h/3).\end{aligned}$$

Ejemplo. Método afín simétrico de orden 4.

$$\begin{aligned}\Phi_{AS4}(h) = & - \frac{1}{6} (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) \\ & + \frac{2}{3} (\Phi_1^+(h/2) \Phi_1^+(h/2) + \Phi_1^-(h/2) \Phi_1^-(h/2)).\end{aligned}\quad (3.51)$$

Por su misma construcción, los métodos afines evalúan los propagadores $\Phi_A(h)$ y $\Phi_B(h)$ en fracciones *siempre positivas* del tamaño de paso h , como surge de las ecuaciones 3.39 y 3.48. Los coeficientes γ_m pueden ser negativos pero esto no genera ninguna inconveniencia ya que son meros *factores de ponderación* de las distintas etapas del esquema.

Por otra parte, a diferencia de la estructura *secuencial* de los esquemas multiplicativos en los que cada etapa demanda el resultado de la anterior (ver ecuación 3.33), los esquemas afines permiten el cálculo independiente de las distintas etapas, haciendo posible su *ejecución paralela*. La Figura 3.1 muestra un ejemplo de paralelización en cuatro procesadores del esquema afín simétrico de orden 6 dado por la expresión 3.47. Los bloques amarillos corresponden a la primera etapa, los azules a la segunda y los verdes a la tercera. Las flechas conectan las operaciones secuenciales. Si la comunicación entre procesadores y la suma de los resultados de las distintas etapas insumen un tiempo despreciable respecto del cálculo de los propagadores Φ_1^{\pm} , el esquema completo puede computarse en un tiempo equivalente a 3 evaluaciones del método de Lie–Trotter. En el caso menos favorable, con solo dos procesadores disponibles, el tiempo total sería el de 6 evaluaciones. En contraste, el método multiplicativo de Yoshida de orden 6 (cuyos coeficientes se detallan en el Cuadro 3.1) demanda prácticamente 8 evaluaciones secuenciales del método de Lie–Trotter. La ventaja del esquema aditivo en este ejemplo es evidente. En general, la diferencia a favor de los esquemas aditivos como consecuencia de la paralelización se incrementa con el orden del método.

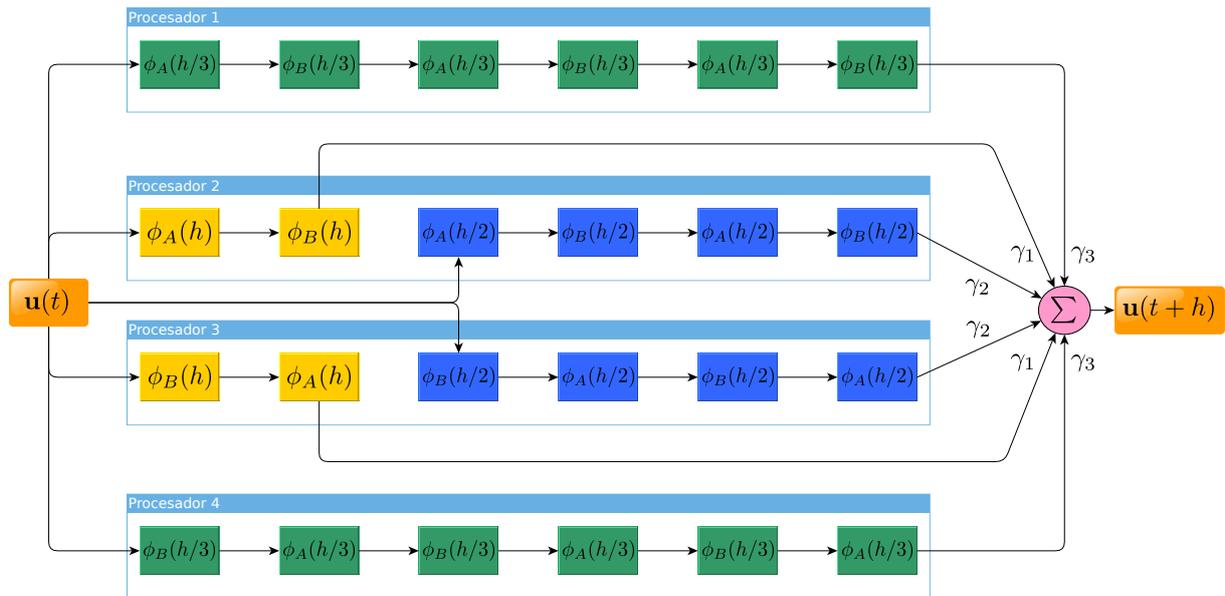


Figura 3.1: Ejemplo de cálculo paralelo de un paso del método afín simétrico de orden 6 en 4 procesadores.

El proceso de extrapolación utilizado para construir los métodos afines se basa en las propiedades de propagadores adjuntos de primer orden y por lo tanto es generalizable sin modificaciones a descomposiciones con más de dos operadores. Por ejemplo, si ϕ_A , ϕ_B y ϕ_C son los propagadores asociados a los tres problemas parciales que surgen de la descomposición $F(u) = A(u) + B(u) + C(u)$ y definimos los propagadores adjuntos de primer orden $\Phi_1^+(h) := \phi_A(h)\phi_B(h)\phi_C(h)$ y $\Phi_1^-(h) := \phi_C(h)\phi_B(h)\phi_A(h)$, las fórmulas 3.39–3.41 y 3.48–3.50 generan métodos afines con coeficientes idénticos a los obtenidos para dos operadores.

Por último, la evaluación del propagador de un método afín proporciona automáticamente la evaluación de los métodos de orden inferior (con otros coeficientes). Por lo tanto, los métodos afines se encuentran trivialmente *embebidos* (Stillfjord, 2018). Un ejemplo de ello surge de la comparación de las expresiones 3.51 y 3.47 para métodos afines de orden 4 y 6. Este hecho permite incorporar a cada método una estimación del error local que puede emplearse en el desarrollo de estrategias *adaptativas*, aspecto que será explorado en el Capítulo 6 y cuyos resultados forman parte de los aportes originales de esta tesis.

En conclusión, podemos afirmar que los métodos afines poseen interesantes cualidades y ventajas respecto de los esquemas multiplicativos, que sintetizamos a continuación:

- se construyen de un modo sistemático para cualquier orden, requiriendo la solución de condiciones de orden *lineales* en los γ_m que involucran coeficientes *racionales*, en contraste con los métodos multiplicativos que requieren la solución de sistemas de ecuaciones polinomiales cuya complejidad crece rápidamente con el orden del método y en general no admiten una expresión exacta;
- están exentos de *pasos negativos* para cualquier orden de convergencia, proporcionando la versatilidad de los métodos de descomposición y la elevada exactitud de los métodos de

alto orden incluso en problemas irreversibles;

- su estructura en etapas independientes permite la *paralelización* de los esquemas, una optimización que no es compatible con los métodos multiplicativos debido a su estructura secuencial;
- pueden aplicarse a *descomposiciones de más de dos operadores* mediante esquemas con idénticos coeficientes, ya que el proceso de extrapolación utilizado para construirlos solo requiere la evaluación de propagadores de Lie-Trotter de primer orden, mientras que la misma generalización para métodos multiplicativos aumenta aún más la complejidad de su construcción y el costo computacional de los esquemas resultantes;
- por construcción, cada método afín *contiene* los métodos de orden inferior, lo cual permite estimar su error local y mejorar su eficiencia mediante estrategias adaptativas.

Adicionalmente, aunque no resulte evidente *a priori*, mostraremos que en determinadas condiciones los métodos afines de alto orden pueden resultar *tan eficientes y exactos* como los esquemas multiplicativos en la preservación de cantidades conservadas incluso en el contexto más favorable a estos últimos de los problemas hamiltonianos y reversibles. Daremos evidencia para sostener esta afirmación en el Capítulo 5 de esta tesis, siendo este resultado otro de los aportes originales de nuestro trabajo.

3.3. Métodos pseudoespectrales

Los esquemas de descomposición introducidos en la sección previa asumen que disponemos de expresiones exactas para los propagadores y que el problema a resolver está expresado mediante un sistema de EDO. Dado que nuestro problema modelo está planteado como una EDP cuya solución es una función en un espacio de dimensión infinita para la que no contamos en general con una expresión analítica exacta, se hace necesario introducir alguna discretización que lo vuelva tratable computacionalmente. En la Sección 4 de [De Leo et al. \(2016\)](#) se muestra que las propiedades de convergencia de los métodos afines se preservan si la discretización representa con suficiente exactitud las funciones y operadores involucrados. Esta condición es satisfecha en el contexto de los modelos investigados recurriendo a los denominados *métodos pseudoespectrales*.

Los métodos pseudoespectrales aproximan las funciones globalmente mediante un desarrollo en serie de funciones ortogonales y están caracterizados por una alta exactitud y eficiencia en problemas con geometrías simples cuando las funciones que se aproximan cuentan con suficiente regularidad. En general, el ritmo de convergencia del desarrollo en serie aumenta con el orden de la derivada continua más alta y por lo tanto son necesarios pocos términos para alcanzar un error dado cuando la función que se aproxima es muy regular. En particular, si la función es analítica y sus derivadas son periódicas, el error en función del número N de términos del desarrollo disminuye más rápido que cualquier potencia finita de $1/N$, propiedad denominada *convergencia espectral o exponencial* ([Boyd, 2000](#); [Canuto et al., 2007](#)). Otra

ventaja significativa de estos métodos es que producen muy bajos *errores de fase* y por lo tanto no introducen dispersión numérica espuria. En lo que sigue describiremos las ideas y técnicas básicas de este método con la profundidad necesaria para los fines de este trabajo. Tratándose de un tema con una rica teoría, numerosas aplicaciones y ramificaciones de distintos niveles de complejidad, se recomienda al lector interesado en mayores detalles la consulta de la excelente bibliografía disponible (Fornberg, 1996; Boyd, 2000; Trefethen, 2000; Canuto et al., 2007; Hesthaven et al., 2007; Kopriva, 2009; Shen et al., 2011).

Sea $\{\varphi_j\}_{j=0}^{\infty}$ una base de un espacio de Hilbert \mathcal{H} de funciones $u : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$, ortogonal respecto a una *función peso* $w(x)$, esto es

$$(\varphi_j, \varphi_k)_w = \int_{\Omega} w(x) \varphi_j(x) \varphi_k^*(x) dx = \|\varphi_j\|_2^2 \delta_{jk}. \quad (3.52)$$

Toda función $u \in \mathcal{H}$ puede escribirse como la serie convergente de funciones

$$u(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j \varphi_j(x), \quad (3.53)$$

siendo \hat{u}_j los *coeficientes de Fourier generalizados* dados por el producto interno

$$\hat{u}_j = \left(u, \frac{\varphi_j}{\|\varphi_j\|_2^2} \right) := \int_{\Omega} w(x) u(x) \frac{\varphi_j^*(x)}{\|\varphi_j\|_2^2} dx. \quad (3.54)$$

Los métodos pseudoespectrales aproximan $u(x)$ truncando la serie infinita 3.53 a una suma finita de N términos

$$u(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} \hat{u}_j \varphi_j(x), \quad (3.55)$$

y aproximando numéricamente el valor de los coeficientes espectrales \hat{u}_j definidos en 3.54 mediante una cuadratura gaussiana estrechamente vinculada a la base ortogonal $\{\varphi_j\}_{j=0}^{\infty}$

$$\hat{u}_j \approx \tilde{u}_j := \sum_{n=0}^{N-1} w_n u(x_n) \frac{\varphi_j^*(x_n)}{\|\varphi_j\|_2^2}, \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (3.56)$$

Las cantidades w_n y x_n son, respectivamente, los *pesos* y *nodos* de la cuadratura definidos de modo de computar *exactamente* el producto interno 3.54 cuando $u(x)$ es una combinación lineal de las $\varphi_j(x)$ con $j = 0, \dots, N-1$. Los valores \tilde{u}_j obtenidos mediante la fórmula de cuadratura 3.56 se denominan *coeficientes pseudoespectrales* de u . Combinando 3.55 y 3.56 se obtiene la aproximación

$$u(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{u}_j \varphi_j(x). \quad (3.57)$$

Para comprender el rol de los \tilde{u}_j y en qué sentido la fórmula anterior proporciona efectivamente una aproximación a u , definimos el *operador de interpolación* I_N como el mapa que a cada función

$u \in \mathcal{H}$ le hace corresponder una (única) combinación lineal de las φ_j con $0 \leq j \leq N-1$

$$I_N u := \sum_{j=0}^{N-1} \hat{c}_j \varphi_j, \quad (3.58)$$

tal que se verifica la *condición de interpolación*

$$(I_N u)(x_j) = u(x_j), \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (3.59)$$

En virtud de la exactitud de 3.56 para toda combinación lineal de las φ_j con $0 \leq j \leq N-1$

$$\hat{c}_j = (I_N u, \frac{\varphi_j}{\|\varphi_j\|_2^2}) = \sum_{n=0}^N w_n u(x_n) \frac{\varphi_j(x_n)}{\|\varphi_j\|_2^2} = \tilde{u}_j, \quad j = 0, \dots, N-1, \quad (3.60)$$

por lo tanto los coeficientes pseudoespectrales de $u(x)$ son los coeficientes generalizados de Fourier de la combinación lineal interpolante $I_N u$ que coincide con $u(x)$ en $x = x_n$. Finalmente, de 3.58, 3.59 y 3.60 resulta

$$u_n := u(x_n) = \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{u}_j \varphi_j(x_n), \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (3.61)$$

Las fórmulas 3.56 y 3.61 se denominan *transformadas discretas directa e inversa*, respectivamente, y son los ingredientes principales de los algoritmos pseudoespectrales, permitiendo calcular los coeficientes pseudoespectrales \tilde{u}_j de u a partir de sus valores en los nodos de la cuadratura u_n y viceversa. El procedimiento descrito implica que la aproximación pseudoespectral involucra un *error de truncamiento* que surge de desechar los términos superiores del desarrollo en serie 3.55 y un *error de interpolación* que resulta de la diferencia entre u y su interpolante 3.58. En lo que sigue, indicaremos mediante \mathbf{u} al vector de componentes u_n que representa la discretización de $u(x)$ (o su aproximación) sobre una grilla, y mediante $\tilde{\mathbf{u}}$ al vector de componentes pseudoespectrales \tilde{u}_j . Las transformadas serán entonces matrices que convierten \mathbf{u} en $\tilde{\mathbf{u}}$ (y viceversa) mediante el producto matricial.

La base particular elegida para la aproximación pseudoespectral dependerá de las características del problema a resolver, de las propiedades de sus soluciones y de las condiciones de contorno que se impongan. En problemas con condiciones de borde periódicas es habitual utilizar polinomios trigonométricos, dando lugar a los clásicos desarrollos en serie de Fourier. En este caso, los coeficientes pseudoespectrales se calculan mediante una cuadratura rectangular o trapezoidal (que resulta gaussiana para funciones periódicas, ver Weideman (2002); Trefethen & Weideman (2014)). Los desarrollos en serie de Fourier también son una elección muy frecuente en problemas planteados en dominios no acotados si las funciones decaen suficientemente rápido para $|x| \rightarrow \infty$. En efecto, considerando un intervalo finito pero suficientemente grande de tal forma que la función y sus derivadas sean despreciables cerca de los extremos es posible preservar las propiedades de convergencia observadas para intervalos acotados. Alternativamente, los problemas en dominios no acotados pueden abordarse utilizando una base de

funciones de Hermite y la correspondiente *cuadratura de Gauss-Hermite* para la aproximación numérica de los coeficientes espectrales. Otras posibilidades para este caso son los desarrollos en funciones *sinc*, funciones racionales de Chebyshev, polinomios ortogonales mapeados, etc. En problemas sobre dominios acotados con condiciones de borde no periódicas, se recurre generalmente a polinomios de Chebyshev u otros polinomios ortogonales que satisfacen las condiciones de borde requeridas (Boyd, 2000; Canuto et al., 2007; Shen et al., 2011). En este trabajo nos concentramos principalmente en métodos pseudoespectrales basados en funciones de Hermite y series de Fourier en dominios unidimensionales no acotados, que son adecuados al problema modelo que se busca resolver. La generalización a múltiples dimensiones es relativamente directa si el problema admite una base de funciones expresable como producto de bases unidimensionales.

Además de la discretización de las funciones de acuerdo a la metodología general indicada, es necesario obtener una representación finita de los operadores que actúan sobre estas. Los detalles específicos de este procedimiento dependen de la base utilizada y serán indicados en lo que sigue en la sección oportuna.

3.3.1. Método pseudoespectral de Fourier

Discretización de funciones. Las exponenciales complejas $\varphi_j(x) = \exp(i\frac{2\pi}{L}x)$, $j \in \mathbb{Z}$, $x \in \mathbb{R}$, forman una base ortogonal de $L^2[0, L]$ con

$$(\varphi_n, \varphi_j) = \int_0^L e^{i\frac{2\pi}{L}(n-j)x} dx = L\delta_{nj}. \quad (3.62)$$

Si $u(x) \in L^2[0, L]$ es una función L -periódica, puede desarrollarse mediante la serie de Fourier convergente

$$u(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \hat{u}_j e^{i\frac{2\pi}{L}jx}, \quad (3.63)$$

donde los coeficientes espectrales de Fourier están dados por

$$\hat{u}_j = (u, \frac{\varphi_j}{L}) = \frac{1}{L} \int_0^L u(x) e^{-i\frac{2\pi}{L}jx} dx, \quad j \in \mathbb{Z}. \quad (3.64)$$

Para aproximar los coeficientes de Fourier puede emplearse una fórmula de cuadratura trapezoidal con N nodos equidistantes $x_n = \frac{L}{N}n$ y pesos $w_n = \frac{L}{N}$ con $n = 0, \dots, N-1$

$$\int_0^L u(x) dx \approx \sum_{n=0}^{N-1} w_n u(x_n) = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{L}{N} u(x_n). \quad (3.65)$$

Puede demostrarse que dicha cuadratura es *exacta* para las exponenciales complejas $e^{i\frac{2\pi}{L}jx}$ con $0 \leq |j| \leq N-1$, y por lo tanto para cualquier combinación lineal de las mismas. Aplicando la fórmula 3.65 a 3.64 obtenemos los coeficientes pseudoespectrales \tilde{u}_j que aproximan los

coeficientes de la serie de Fourier

$$\hat{u}_j \approx \tilde{u}_j := \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u(x_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}jn}, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.66)$$

Como consecuencia del muestreo discreto de la función u sobre la grilla de nodos equidistantes x_n , los coeficientes \tilde{u}_j resultan N -periódicos ya que

$$\tilde{u}_{j\pm N} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u(x_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(j\pm N)n} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u(x_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}jn} e^{\pm i2\pi n} = \tilde{u}_j, \quad (3.67)$$

lo cual implica que solo N coeficientes son independientes. En particular, si N es par tenemos que $\tilde{u}_{-N/2} = \tilde{u}_{N/2}$, por lo tanto los modos con $j = \pm N/2$ son indistinguibles sobre la grilla discreta x_n , fenómeno que se conoce como *solapamiento* o *aliasing* (por su denominación en inglés). Estas observaciones sugieren escribir la *transformada discreta de Fourier* (DFT) que transforma los $u_n = u(x_n)$ en los \tilde{u}_j como

$$\tilde{u}_j := \frac{1}{b_j N} \sum_{n=0}^{N-1} u_n e^{-i\frac{2\pi}{N}jn}, \quad j = -N/2, \dots, N/2, \quad (3.68)$$

con $b_j = 1$ si $|j| < N/2$ y $b_j = 2$ si $j = \pm N/2$. Expresamos esta transformación lineal en la forma matricial

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathfrak{F}_N \mathbf{u}.$$

Recíprocamente, definimos el espacio de polinomios trigonométricos generado por las exponenciales complejas $\exp(i\frac{2\pi}{L}jx)$ con $j = -N/2, \dots, N/2$ como el conjunto

$$\mathfrak{J}_N = \left\{ f : f(x) = \sum_{j=-N/2}^{N/2} \hat{c}_j e^{i\frac{2\pi}{L}jx}, \hat{c}_j \in \mathbf{C}, \hat{c}_{-N/2} = \hat{c}_{N/2} \right\}, \quad (3.69)$$

y el operador de interpolación como el mapa $I_N : C[0, L] \rightarrow \mathfrak{J}_N$ tal que

$$(I_N u)(x_n) = u(x_n). \quad (3.70)$$

Entonces los coeficientes \hat{c}_j de $I_N u$ resultan

$$\begin{aligned} \hat{c}_j &= \frac{1}{L} \int_0^L (I_N u)(x) e^{-i\frac{2\pi}{L}jx} dx \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (I_N u)(x_n) e^{-i\frac{2\pi}{L}jx_n} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u(x_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}jn} = \tilde{u}_j, \end{aligned} \quad (3.71)$$

de tal suerte que la integral está dada exactamente por la fórmula de cuadratura. Por lo tanto, los coeficientes pseudospectrales de u son los coeficientes de Fourier del polinomio trigono-

métrico interpolante. Finalmente, llegamos a la *transformada discreta inversa de Fourier* (IDFT)

$$u_n = \sum_{j=-N/2}^{N/2} \tilde{u}_j e^{i\frac{2\pi}{L} j x_n} = \sum_{j=-N/2}^{N/2} \tilde{u}_j e^{i\frac{2\pi}{N} j n}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.72)$$

que puede representarse como

$$\mathbf{u} = \mathfrak{F}_N^{-1} \tilde{\mathbf{u}}.$$

De manera general, para desarrollar una función en el intervalo $I = [a, b]$ podemos usar una base trasladada compuesta por las funciones ortogonales

$$\varphi_j(x) = \exp\left(i\frac{2\pi}{b-a} j (x-a)\right), \quad (3.73)$$

donde el número de onda correspondiente a cada elemento de la base es

$$k_j = \frac{2\pi}{b-a} j. \quad (3.74)$$

En ese caso, el producto interno 3.54 se calcula en el intervalo $\Omega = I$ y se considera una cuadratura rectangular con pesos $w_n = (b-a)/N$ y nodos $x_n = a + \frac{b-a}{N}n$. De allí surge que los coeficientes \tilde{u}_j también se obtienen mediante la fórmula 3.68.

Discretización del operador lineal. Dado el operador lineal A mediante el símbolo $\mathcal{A}(k)$, su versión discreta en el espacio de números de onda es la matriz *diagonal*

$$\tilde{\mathbf{A}} = \text{diag}(\mathcal{A}(\mathbf{k})),$$

siendo $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ el vector cuyos elementos son $\mathcal{A}(k_j)$ con $k_j = \frac{2\pi}{b-a}j$, $j = -N/2, \dots, N/2 - 1$. La acción de dicho operador sobre el vector de coeficientes pseudoespectrales es

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{u}} = \mathcal{A}(\mathbf{k}) \odot \tilde{\mathbf{u}},$$

donde \odot denota el producto elemento a elemento o *producto de Hadamard*. Por lo tanto su acción sobre la discretización espacial de la función u dada por el vector \mathbf{u} se obtiene mediante

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathfrak{F}_N^{-1}(\mathcal{A}(\mathbf{k}) \odot \mathfrak{F}_N\mathbf{u}).$$

Discretización del propagador lineal. La solución del problema parcial lineal 3.8 en el espacio de frecuencias es

$$\hat{u}(k, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t \mathcal{A}(k)} \hat{u}(k, t),$$

y su versión discretizada asume la forma

$$\tilde{\mathbf{u}}(t + \Delta t) = e^{-i\Delta t \mathcal{A}(\mathbf{k})} \odot \tilde{\mathbf{u}}(t),$$

por lo tanto la solución en la grilla resulta

$$\mathbf{u}(t + \Delta t) = \mathfrak{F}_N^{-1} \left(e^{-i\Delta t \mathcal{A}(\mathbf{k})} \odot \mathfrak{F}_N \mathbf{u}(t) \right) =: \Phi_A(\Delta t) \mathbf{u}(t),$$

siendo $e^{-i\Delta t \mathcal{A}(\mathbf{k})}$ el vector cuyos elementos son $e^{-i\Delta t \mathcal{A}(k_j)}$. Esta última fórmula define el propagador numérico $\Phi_A(\Delta t)$ a partir del símbolo del operador lineal $\mathcal{A}(k)$ y la transformada de Fourier.

Discretización del Hamiltoniano. En los modelos hamiltonianos investigados, el Hamiltoniano está dado por la ecuación 2.15. A partir del desarrollo espectral

$$Au(x) = \sum_j \mathcal{A}(k_j) \hat{u}_j e^{i\frac{2\pi}{L} jx},$$

obtenemos

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} (Au, u) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^L \left(\sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k_j) \hat{u}_j e^{i\frac{2\pi}{L} jx} \right) \left(\sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{u}_l^* e^{-i\frac{2\pi}{L} lx} \right) dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k_j) \hat{u}_j \hat{u}_l^* \int_0^L e^{i\frac{2\pi}{L} (j-l)x} dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k_j) \hat{u}_j \hat{u}_l^* L \delta_{jl} \\ &= \frac{1}{2} L \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k_j) |\hat{u}_j|^2. \end{aligned}$$

La aproximación pseudoespectral de T es entonces

$$\tilde{T} = \frac{1}{2} L \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \mathcal{A}(k_j) |\tilde{u}_j|^2,$$

mientras que la aproximación de V se obtiene mediante una cuadratura trapezoidal

$$\tilde{V} = \frac{\gamma}{4} \frac{L}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |u_n|^4,$$

por lo tanto la aproximación del Hamiltoniano resulta

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} L \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \mathcal{A}(k_j) |\tilde{u}_j|^2 + \frac{\gamma}{4} \frac{L}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |u_n|^4.$$

3.3.2. Método pseudoespectral de Hermite

Propiedades generales. Las *funciones de Hermite* han sido aplicadas exitosamente en numerosos problemas con soluciones rápidamente decrecientes en dominios no acotados (Tang, 1993; Ma et al., 2005; Bao & Shen, 2005; Thalhammer et al., 2009; Gauckler, 2011; Mao & Shen, 2017; Tang et al., 2018; Xia et al., 2021; Chou et al., 2023). Las mismas forman una base del espacio $L^2(\mathbb{R})$ y se definen a partir de los *polinomios ortogonales de Hermite* $H_j(x)$ como

$$\varphi_j(x) = c_j e^{-\frac{x^2}{2}} H_j(x), \quad (3.75)$$

siendo $c_j = (2^j j! \sqrt{\pi})^{-1/2}$ la constante de normalización (Boyd, 2000; Shen et al., 2011). Pueden construirse y evaluarse teóricamente mediante una fórmula de recursión de tres términos

$$\varphi_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad \varphi_1(x) = \pi^{-1/4} \sqrt{2} e^{-\frac{x^2}{2}} x \quad (3.76)$$

$$\varphi_j(x) = \sqrt{\frac{2}{j}} x \varphi_{j-1}(x) - \sqrt{\frac{j-1}{j}} \varphi_{j-2}(x), \quad j \geq 2, \quad (3.77)$$

y satisfacen la condición de ortogonalidad 3.52 con $\|\varphi_j\|_2^2 = 1$

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi_j \varphi_n dx = \delta_{jn}. \quad (3.78)$$

Estas funciones especiales exhiben muchas propiedades interesantes, entre ellas la de ser *autofunciones* de la transformada de Fourier unitaria

$$\mathcal{F}\{\varphi_j\} = \widehat{\varphi}_j = (-i)^j \varphi_j. \quad (3.79)$$

También son *autofunciones del oscilador armónico cuántico*, esto es, de la ecuación de Schrödinger lineal con un potencial cuadrático. Por este motivo, han sido utilizadas como base de métodos pseudoespectrales para la solución de la ecuación de Gross–Pitaevskii con potencial cuadrático, un modelo matemático efectivo del fenómeno de condensación de Bose–Einstein (Bao et al., 2003; Bao & Shen, 2005; Carretero-González et al., 2008; Thalhammer et al., 2009; Gauckler, 2011; Thalhammer & Abhau, 2012; Thalhammer, 2012; Antoine et al., 2013).

Discretización de funciones. Sea P_M el conjunto de todos los polinomios $p(x)$ de grado no mayor que M y

$$\mathfrak{H}_M = \{f : f = e^{-x^2} p(x), p(x) \in P_M\}. \quad (3.80)$$

Si los *nodos* $\{x_n\}_{n=0}^{N-1}$ son las raíces del polinomio de Hermite $H_N(x)$ y los *pesos* $\{w_n\}_{n=0}^{N-1}$ están dados por

$$w_n = \frac{1}{N \varphi_{N-1}^2(x_n)}, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad (3.81)$$

entonces la siguiente *fórmula de cuadratura de Hermite-Gauss* es exacta $\forall f \in \mathfrak{H}_{2N-1}$ (Shen et al., 2011)

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) dx = \sum_{n=0}^{N-1} w_n f(x_n). \quad (3.82)$$

La fórmula 3.82 permite el cálculo *exacto* de los coeficientes espectrales de Fourier–Hermite 3.54 asociados a la base de funciones de Hermite cuando $u \in \mathfrak{H}_{N-1}$; en general, la misma proporciona los coeficientes del interpolante 3.58.

En problemas concretos es recomendable dotar de cierta flexibilidad a las funciones base, contemplando la posibilidad de trasladarlas y dilatarlas mediante una transformación lineal afín de la coordenada espacial

$$x' = sx + c. \quad (3.83)$$

Este requerimiento motiva la definición de la *base de funciones de Hermite modificada*

$$\varphi_j^{s,c}(x') = \varphi_j\left(\frac{x' - c}{s}\right), \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (3.84)$$

En efecto, ha sido reportado en muchos trabajos que una elección oportuna del parámetro de escala s mejora la velocidad de convergencia del método, lográndose mayor exactitud con menor cantidad de términos (Tang, 1993; Boyd, 2000; Ma et al., 2005; Tang et al., 2018). Por otra parte, la transformación afín 3.83 junto con una adecuación de la dimensión N permiten un ajuste dinámico de la base 3.84 a la solución por medio de algoritmos adaptativos (Xia et al., 2021; Chou et al., 2023). Las funciones base modificadas son ortogonales con norma $\|\varphi_j^{s,c}\|_2^2 = s$ y los coeficientes generalizados de Fourier de $u(x)$ se calculan en esta base mediante la fórmula

$$\hat{u}_j = \left(u, \frac{\varphi_j^{s,c}}{\|\varphi_j^{s,c}\|_2^2} \right) = \frac{1}{s} \int_{\mathbb{R}} u(x') \varphi_j^{s,c}(x') dx' = \int_{\mathbb{R}} u(sx + c) \varphi_j(x) dx. \quad (3.85)$$

Consecuentemente, los coeficientes pseudoespectrales asociados a la base modificada se obtienen por medio de una cuadratura de Gauss–Hermite evaluando la función $u(x)$ en una *grilla de nodos modificados* $x'_n = sx_n + c$

$$\tilde{u}_j = \sum_{n=0}^{N-1} w_n u(x'_n) \varphi_j(x_n), \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (3.86)$$

En notación matricial

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{H}^+ \mathbf{u},$$

con

$$\mathbf{H}^+ = \varphi \cdot \text{diag}(w_n), \quad (3.87)$$

siendo $\text{diag}(w_n)$ la matriz cuya diagonal es el vector de pesos w_n de la cuadratura de Gauss–Hermite y φ la matriz cuyas filas contienen los valores de las funciones de Hermite evaluadas en los nodos x_n de la cuadratura, esto es $\varphi_{jn} := \varphi_j(x_n)$. Los valores de u en la grilla x'_n , a su vez,

están dados por la fórmula

$$u_n = u(x'_n) = \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{u}_j \varphi_j^{s,c}(x'_n) = \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{u}_j \varphi_j(x_n). \quad (3.88)$$

Matricialmente

$$\mathbf{u} = \mathbf{H}^{-1} \tilde{\mathbf{u}}, \quad (3.89)$$

con

$$\mathbf{H}^{-1} = \varphi^T. \quad (3.90)$$

Las ecuaciones 3.86 y 3.88 son las transformadas de Hermite directa e inversa para la base de funciones de Hermite modificadas. De 3.87 y 3.90 resulta que las mismas pueden calcularse mediante un producto matriz-vector con costo $\mathcal{O}(N^2)$ una vez que los nodos x_n , los pesos w_n y la matriz $\varphi_{jn} = \varphi_j(x_n)$ han sido precalculados.

Discretización del operador lineal. La acción del operador lineal A en la base de funciones de Hermite modificadas puede obtenerse a partir de⁸

$$\begin{aligned} \hat{u}_l' &= (\widehat{A}u)_l = \left(Au, \frac{\varphi_l^{s,c}}{\|\varphi_l^{s,c}\|_2^2} \right) = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j \left(A\varphi_j^{s,c}, \frac{\varphi_l^{s,c}}{\|\varphi_l^{s,c}\|_2^2} \right) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j \frac{1}{s} \left(\mathcal{F}A\varphi_j^{s,c}, \mathcal{F}\varphi_l^{s,c} \right) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \hat{A}_{lj} \hat{u}_j, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (3.91)$$

donde hemos aplicado la unitariedad de la TF y hemos definido la matriz

$$\hat{A}_{lj} = \frac{1}{s} \left(\mathcal{F}A\varphi_j^{s,c}, \mathcal{F}\varphi_l^{s,c} \right) = \frac{1}{s} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) \mathcal{F}\varphi_j^{s,c}(k) \mathcal{F}(\varphi_l^{s,c})^*(k) dk, \quad j, l = 0, 1, 2, \dots$$

Por otra parte, la definición de la TF y la propiedad 3.79 permiten escribir

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\varphi_j^{s,c}(k) &= \int_{\mathbb{R}} \varphi_j\left(\frac{x-c}{s}\right) e^{-ikx} dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \varphi_j(x') e^{-ik(sx'+c)} s dx' \\ &= s e^{-ikc} \int_{\mathbb{R}} \varphi_j(x') e^{-iksx'} dx' \\ &= s e^{-ikc} \mathcal{F}\varphi_j(sk) \\ &= s e^{-ikc} (-i)^j \varphi_j(sk), \end{aligned} \quad (3.92)$$

⁸Notar que en esta sección indicamos la transformada de Fourier de u mediante $\mathcal{F}u$ en lugar de \hat{u} , reservando esta última notación para los coeficientes espectrales en la base de Hermite.

y por lo tanto

$$\widehat{A}_{lj} = (-i)^{j-l} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k/s) \varphi_j(k) \varphi_l(k) dk, \quad j, l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.93)$$

Los elementos de matriz 3.93 pueden aproximarse mediante una cuadratura de Hermite–Gauss con N' puntos

$$\widehat{A}_{lj} \approx \widetilde{A}_{lj} := (-i)^{j-l} \sum_{n=0}^{N'-1} w_n \mathcal{A}(k_n/s) \varphi_j(k_n) \varphi_l(k_n), \quad j, l = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.94)$$

donde k_n son los ceros del polinomio de Hermite de orden N' ⁹. Finalmente, la acción de A sobre u en representación pseudoespectral resulta de truncar el desarrollo 3.91 a N términos, aproximar los elementos de matriz mediante 3.94 y sustituir los coeficientes espectrales \widehat{u}_j por su aproximación pseudoespectral, obteniéndose

$$\widetilde{u}'_l = (\widetilde{A}u)_l = \sum_{j=0}^{N-1} \widetilde{A}_{lj} \widetilde{u}_j, \quad l = 0, 1, \dots, N-1.$$

La expresión anterior puede escribirse en la notación matricial

$$\widetilde{u}' = \widetilde{A}u = \widetilde{A}\widetilde{u},$$

siendo \widetilde{A} la matriz cuyos elementos están definidos por 3.94.

Discretización del propagador lineal. La transformada de Fourier del subproblema 3.2 asociado al operador lineal A es

$$i\partial_t \widehat{u}(k, t) = \widehat{A}u(k, t).$$

Sustituyendo \widehat{u} y $\widehat{A}u$ por sus aproximaciones pseudoespectrales resulta el sistema lineal de EDO de orden N

$$i\partial_t \widetilde{u}(t) = \widetilde{A}\widetilde{u}(t),$$

cuya solución es

$$\widetilde{u}(t + \Delta t) = \exp(-i\Delta t \widetilde{A}) \widetilde{u}(t). \quad (3.95)$$

La expresión 3.95 permite calcular la evolución de los coeficientes pseudoespectrales de u a partir de la exponencial de la matriz $-i\Delta t \widetilde{A}$. La evolución de u en la grilla espacial se obtiene

⁹La cuadratura será exacta siempre que $e^{x^2} \varphi_j(k) \mathcal{A}(k/s) \varphi_l(k) = H_j(k) \mathcal{A}(k/s) H_l(k)$ sea un polinomio de grado $2N' - 1$ o menor (Press et al., 2007). Esto es, cuando $\mathcal{A}(k/s)$ sea un polinomio de grado $2(N' - N) + 1$ o menor. Si A es un operador diferencial de segundo orden, $\mathcal{A}(k/s)$ es un polinomio de grado 2 y los elementos de matriz se obtienen exactamente tomando $N' = N + 1$, como ocurre en todos los modelos no fraccionarios considerados en esta tesis. Los modelos fraccionarios, al no estar representados por símbolos polinomiales, requieren una cuadratura con más puntos para lograr una aproximación suficientemente exacta del operador lineal. Cuadraturas más costosas pueden calcularse con precisión arbitraria sin mayor impacto en el rendimiento de los algoritmos, ya que la discretización de este operador se realiza por única vez si la base de funciones de Hermite es constante.

introduciendo las transformadas discretas directa 3.87 e inversa 3.90 mediante la fórmula

$$\mathbf{u}(t + \Delta t) = (\mathbf{H}^- \exp(-i\Delta t \tilde{\mathbf{A}}) \mathbf{H}^+) \mathbf{u}(t) =: \Phi_A(\Delta t) \mathbf{u}(t), \quad (3.96)$$

en la que hemos definido el propagador numérico $\Phi_A(\Delta t) = \mathbf{H}^- \exp(-i\Delta t \tilde{\mathbf{A}}) \mathbf{H}^+$ asociado al operador A , requerido para la construcción de los esquemas de descomposición. La acción del propagador numérico Φ_A puede computarse mediante un producto matriz–vector con costo $\mathcal{O}(N^2)$.

Discretización del Hamiltoniano. A partir del Hamiltoniano general 2.15, la definición del operador A , la unitariedad de la TF y las ecuaciones 3.92 y 3.93 resulta

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} (Au, u) \\ &= \frac{1}{2} (\mathcal{F}Au, \mathcal{F}u) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) |\mathcal{F}u|^2 dk \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) \mathcal{F} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j \varphi_j^{s,c} \right) \mathcal{F} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_l \varphi_l^{s,c} \right)^* dk \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j \mathcal{F} \varphi_j^{s,c} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_l \mathcal{F} \varphi_l^{s,c} \right)^* dk \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \hat{u}_j s (-i)^j \varphi_j(sk) \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_l^* s (-i)^{-l} \varphi_l(sk) \right) dk \\ &= \frac{1}{2} s^2 \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_j \hat{u}_l^* (-i)^{j-l} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) \varphi_j(sk) \varphi_l(sk) dk \\ &= \frac{1}{2} s \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_j \hat{u}_l^* (-i)^{j-l} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k/s) \varphi_j(k) \varphi_l(k) dk \\ &= \frac{1}{2} s \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \hat{u}_l^* \hat{A}_{lj} \hat{u}_j \end{aligned}$$

Sustituyendo los coeficientes espectrales y la matriz por sus respectivas aproximaciones pseudo-espectrales obtenemos la siguiente aproximación de T en forma matricial

$$\tilde{T} = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}^\dagger s \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{u}}.$$

Por otra parte

$$V = \frac{\gamma}{4} \int_{\mathbb{R}} |u|^4 dx,$$

y mediante una cuadratura de Gauss–Hermite con pesos w_n obtenemos la aproximación

$$\tilde{V} = \frac{\gamma}{4} \sum_{n=0}^{N-1} w_n |u_n|^4.$$

Por lo tanto, la aproximación pseudoespectral para el Hamiltoniano en la base de Hermite resulta

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}^\dagger \mathbf{s} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{u}} + \frac{\gamma}{4} \sum_{n=0}^{N-1} w_n |u_n|^4.$$

Capítulo 4

Implementación computacional

En lo que sigue describimos las herramientas computacionales desarrolladas para la implementación de los métodos numéricos y los modelos de interés. Entendemos los códigos elaborados no solo como medios para la realización de nuestra investigación sino principalmente como recursos necesarios para la reproducibilidad y verificación independiente de los resultados presentados. Adicionalmente, los mismos sientan las bases para futuros desarrollos y extensiones, tanto del autor como de otros interesados.

La implementación se realizó en el lenguaje de programación Python¹. Python es un lenguaje de propósito general, fácil de aprender debido a una sintaxis transparente pero al mismo tiempo potente como consecuencia de la variedad de paradigmas de programación que soporta (procedimental, orientado a objetos y funcional). Está dotado de una extensa biblioteca estándar y cuenta con sólidos recursos provistos por la comunidad para el desarrollo de sistemas de software complejos que incluyen interfaces gráficas de usuario, conectividad a redes, acceso a bases de datos, etc. (Oliphant, 2007; Langtangen, 2008; Perez et al., 2010). Gracias a las librerías NumPy (Harris et al., 2020) y SciPy (Virtanen et al., 2020), que implementan de manera fiable y eficiente numerosos algoritmos de cálculo numérico, se ha convertido en uno de los lenguajes más populares para computación científica. Esta base cimenta el denominado *ecosistema científico de Python*, que incluye las librerías Matplotlib para visualización científica (Hunter, 2007), Pandas para el análisis de datos (McKinney et al., 2010), SymPy para cálculo simbólico (Meurer et al., 2017) y los entornos IPython y Jupyter para el desarrollo de algoritmos y exploración de datos en forma interactiva (Kluyver et al., 2016; Granger & Pérez, 2021). Cabe destacar que este ecosistema también proporciona herramientas para computación de alto rendimiento en arquitecturas híbridas y distribuidas, como Cython (Behnel et al., 2010), Numba (Lam et al., 2015) y mpi4py (Dalcin & Fang, 2021), lo que hace viable en el futuro cercano la paralelización y optimización de los métodos numéricos investigados en este trabajo.

Además de satisfacer todos nuestros requerimientos desde el punto de vista computacional, estas herramientas fueron elegidas en su calidad de *software libre*². Un software es libre si goza de las 4 libertades fundamentales:

¹<https://www.python.org>.

²https://es.wikipedia.org/wiki/Software_libre.

1. puede utilizarse para cualquier propósito;
2. puede estudiarse y conocerse su funcionamiento porque su *código fuente* es público, permitiendo que el usuario lo modifique para adecuarlo a sus necesidades;
3. puede ser redistribuido en su forma original;
4. puede ser compartido en forma modificada incluyendo las mejoras realizadas.

Normalmente, este tipo de software es desarrollado, mantenido y documentado por una comunidad en la que se discuten abiertamente los *bugs* (defectos) y las propuestas de cambios y mejoras. Adicionalmente, aunque no es una condición necesaria para que un software sea *libre*, suele estar disponible *gratuitamente* en Internet. Consideramos que este enfoque resulta coherente con los fines de la investigación científica y la socialización del conocimiento, y por lo tanto con los objetivos del presente trabajo.

4.1. Detalles de implementación

El software está organizado de manera modular a partir de un diseño orientado a objetos. Al momento de la presentación de esta tesis se encuentra en estado de prototipo funcional y ha permitido generar todos los resultados publicados. Sin embargo, su desarrollo es continuo y la interfaz puede modificarse en el futuro cercano. El código fuente está disponible como *software libre* en el repositorio [Raviola \(2023\)](#) bajo las condiciones de la Licencia Pública General versión 3.0 (GPLv3)³. Aunque la totalidad del software puede consultarse en el repositorio indicado, discutimos a continuación algunos detalles de implementación que consideramos relevantes por su impacto en el rendimiento de los algoritmos.

4.1.1. Aspectos computacionales de la discretización espacial

Los propagadores numéricos Φ_A, Φ_B a partir de los cuales se construyen los distintos esquemas de descomposición dependen de la discretización espacial elegida. En lo que sigue se explicitan algunos detalles computacionales que consideramos relevantes, utilizando las bases de Fourier y Hermite.

4.1.1.1. Método de Fourier

Las transformadas discretas directa \mathfrak{F}_N e inversa \mathfrak{F}_N^{-1} definidas en las ecuaciones 3.68 y 3.72 pueden computarse en forma muy eficiente mediante la *transformada rápida de Fourier* (*FFT*, *Fast Fourier Transform*). Se trata de uno de los algoritmos numéricos más importantes del siglo XX y posee la virtud de reducir la complejidad computacional de la *DFT* de $\mathcal{O}(N^2)$ (correspondiente a una multiplicación matriz–vector) a $\mathcal{O}(N \log_2 N)$ ([Rockmore, 2000](#)). La *FFT* se encuentra implementada por las funciones `fft` e `ifft` de la librería SciPy. Debe notarse que las implementaciones de la *FFT* provistas por distintas librerías y entornos de computación científica

³<https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.en.html>

pueden no corresponder exactamente con las definiciones dadas por las fórmulas 3.68 y 3.72. En el caso de SciPy, nuestras definiciones requieren invocar las funciones `fft` e `ifft` con el parámetro `norm='forward'`.

4.1.1.2. Método de Hermite

La implementación eficiente y exacta de las transformadas discretas de Hermite 3.86 y 3.88 depende de la eficiencia y exactitud con la que se realice la evaluación de las funciones de Hermite φ_j , y el cálculo de nodos x_n y pesos w_n de la cuadratura. A continuación detallamos el modo en que este problema ha sido resuelto computacionalmente en el presente trabajo.

Evaluación de las funciones de Hermite. La función de Hermite $\varphi_j(x)$ puede teóricamente evaluarse con complejidad $\mathcal{O}(j)$ mediante la fórmula de recurrencia de tres términos 3.77. Sin embargo, la evaluación ingenua para $|x| \gtrsim 38,6$ en doble precisión produce resultados erróneos como consecuencia de que el factor $e^{-x^2/2}$ involucrado en los primeros términos de la recurrencia se evalúa numéricamente como cero ya que está por debajo del valor más pequeño distinto de cero representable en doble precisión (*underflow*). Esto se vuelve particularmente evidente para funciones de Hermite de orden $j \gtrsim 700$ cuyos valores para $|x| \approx 38,6$ comienzan a ser apreciablemente distintos de cero (Bourquin & Gradinaru, 2016). Para evitar este problema, usamos la técnica de estabilización propuesta en el Apéndice A de Bunck (2009). Partimos de la iteración modificada

$$\begin{aligned}\hat{h}_0(x) &= c_0 H_0(x), \\ \hat{h}_1(x) &= c_1 H_1(x), \\ \hat{h}_i(x) &= \left(\sqrt{\frac{2}{i}} x \hat{h}_{i-1}(x) - \sqrt{\frac{i-1}{i}} \hat{h}_{i-2}(x) \right) E_i(x), \quad i \geq 2\end{aligned}$$

en la que $H_i(x)$ son polinomios de Hermite y $E_i(x) = e^{-m_i(x)}$ con $m_i(x)$ un entero no negativo elegido en cada iteración de tal suerte que el correspondiente iterando sea $\mathcal{O}(1)$. Finalmente, calculamos la función de Hermite $\varphi_j(x)$ a partir del último iterando mediante

$$\varphi_j(x) = \hat{h}_j(x) \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2} + \sum_{i=2}^j m_i(x)\right). \quad (4.1)$$

La implementación en Python de esta estrategia se muestra en el Algoritmo 4.1. En la línea 16 se calcula el iterando i a partir de los dos iterandos anteriores. En la línea 19 se determina un entero $m_i(x)$ tal que $e^{m_i(x)}$ sea aproximadamente igual al módulo del valor recién calculado. En la línea 24 el iterando se redefine multiplicándolo por $e^{-m_i(x)}$ para que resulte $|\hat{h}_i(x)| \approx 1$. Los exponentes enteros aplicados en cada iteración se van acumulando (línea 27), para luego «deshacer» su efecto (línea 29) multiplicando el iterando final por $\exp\left(\sum_{i=2}^j m_i(x)\right)$. Dado que $|\varphi_j(x)| \leq \pi^{-1/4} \sim \mathcal{O}(1)$ y que $\hat{h}_j(x) \sim \mathcal{O}(1)$ por construcción, la exponencial en 4.1 también es $\mathcal{O}(1)$. Notar que el algoritmo resulta automáticamente vectorizado debido al uso de la librería

Algoritmo 4.1 Evaluación estable de las funciones de Hermite en doble precisión.

```

1 import numpy as np
2 from numpy import pi, sqrt, exp, log, abs
3
4 def hermite_function(n, x):
5
6     if n == 0:
7         return np.ones_like(x) * pi**(-0.25) * exp(-x**2 / 2)
8     if n == 1:
9         return sqrt(2) * x * pi**(-0.25) * exp(-x**2 / 2)
10
11     h_i_2 = np.ones_like(x) * pi**(-0.25)
12     h_i_1 = sqrt(2) * x * pi**(-0.25)
13     sum_m_i = np.zeros_like(x)
14
15     for i in range(2, n + 1):
16         h_i = sqrt(2 / i) * x * h_i_1 - sqrt((i - 1) / i) * h_i_2
17         h_i_2, h_i_1 = h_i_1, h_i
18
19         m_i = log(abs(h_i),
20                 out=np.zeros_like(abs(h_i)),
21                 where=abs(h_i)>1).round()
22
23         scale = exp(-m_i)
24         h_i = h_i * scale
25         h_i_1 = h_i_1 * scale
26         h_i_2 = h_i_2 * scale
27         sum_m_i += m_i
28
29     return h_i * exp(-x**2 / 2 + sum_m_i)

```

NumPy, devolviendo la función de Hermite de orden j evaluada en todos los valores del vector x suministrado como parámetro de entrada. De esta forma es posible evaluar con elevada exactitud las funciones de Hermite para un amplio rango de valores de x y j , aunque ahora la complejidad del algoritmo resulta mayor a $\mathcal{O}(j)$ debido a la lógica adicional introducida para superar las limitaciones del abordaje ingenuo. En [Bunck \(2009\)](#) también se propone un algoritmo de complejidad $\mathcal{O}(\sqrt{j})$ basado en la representación de funciones de Hermite mediante integrales de contorno y desarrollos asintóticos, pero su implementación es menos transparente. Para nuestros fines, el algoritmo 4.1 logra un balance adecuado entre simplicidad de implementación, exactitud y eficiencia.

Cálculo de nodos y pesos modificados de la cuadratura. Los nodos x_n se obtienen mediante la función `roots_hermite` de la librería SciPy. Esta función implementa el algoritmo propuesto por [Townsend et al. \(2015\)](#) cuya complejidad computacional es $\mathcal{O}(N)$ y cuya exactitud es cer-

cana al orden de precisión de máquina (en doble precisión). Una vez obtenidos los nodos, los pesos resultan de la ecuación 3.81 en la que se requiere la evaluación de la función de Hermite de orden $N - 1$ en los nodos ya calculados $\varphi_{N-1}(x_n)$, utilizando el algoritmo 4.1.

Discretización del propagador lineal. Una vez definida la matriz $\tilde{\mathbf{A}}$ mediante la ecuación 3.94, el propagador numérico lineal se obtiene a partir de la ecuación 3.96 utilizando la función `expm` (exponencial matricial) incluida en la librería SciPy, que implementa algoritmos basados en aproximantes de Padé de orden variable propuestos por Al-Mohy & Higham (2010) y Higham & Tisseur (2000). Determinado el propagador numérico para un tamaño de paso h , la aplicación del mismo consiste en una multiplicación matriz-vector de complejidad $\mathcal{O}(N^2)$. Si el tamaño de paso es fijo, el propagador no necesita recalcularse.

4.2. Uso básico del software

Para ejemplificar un flujo de trabajo típico con el software desarrollado, el Algoritmo 4.2 muestra el listado básico de código para la obtención de la solución numérica de la NLSE3 a partir de un dato inicial de tipo solitón. Un procedimiento similar será utilizado en los ejemplos numéricos del Capítulo 5. Este código recurre a los módulos, clases y funciones implementados especialmente para la realización de esta tesis.

En las líneas 5 a 9 se importan los módulos y clases desarrollados. En las líneas 12 a 14 se definen los parámetros para la discretización pseudoespectral y se crea una instancia de la clase `FourierBasis` que contiene los atributos y métodos asociados a la base pseudoespectral de Fourier, según lo detallado en la Sección 3.3. En este caso, la dimensión de la base es $N = 2^{11}$ y el intervalo es $I = [-50, 50]$. En las líneas 17 a 19 se define el dato inicial, correspondiente al solitón $u_0(x) = \text{sech}(x)e^{i\frac{1}{2}x}$ con velocidad $v = 0,5$ (ver fórmula 5.4), mediante la clase `State` utilizando la base previamente definida. En la línea 22 se crea una instancia del modelo `NLSE3Model1D`. En ausencia de parámetros, esta clase genera por defecto el modelo NLSE3 definido por la ecuación 2.7 del Capítulo 2 para el caso *enfocante* con $\gamma = -1$. La línea 24 crea una instancia de la clase `AffineSym6`, que implementa el método aditivo simétrico de orden 6. En la línea 26 se instancia el `Solver`, que implementa la lógica para simular la evolución a partir del modelo y el método indicados. En las líneas 29 a 31 se indican los tiempos inicial y final de simulación, que junto con el dato inicial permiten inicializar el `Solver`. La línea 34 crea una lista para almacenar las tuplas (t, u) que definen la trayectoria de la solución numérica, siendo t el tiempo y u el estado (solución aproximada) correspondiente. Entre las líneas 37 y 42 se desarrolla el bucle principal de la simulación. El método `solver.step(dt)` avanza la simulación en un tiempo dt , que en este ejemplo es 10^{-2} . Luego de cada paso, se almacena el tiempo y el estado correspondiente (línea 42).

La visualización de algunos resultados de la simulación se obtiene mediante el código del Algoritmo 4.3, cuyas gráficas se muestran en la Figura 4.1. El panel superior de la misma exhibe el módulo de la solución numérica en función de x para los instantes $t = 0$ (dato inicial, línea azul) y $t = 10$ (línea naranja), revelando el movimiento del solitón con velocidad $v = 0,5$. El

panel central muestra el valor absoluto del error $|u(x, t = 10) - u_{\text{ref}}(x, t = 10)|$ de la solución numérica en función de x , en escala logarítmica. Puede observarse que este error es menor que 10^{-12} para todo x . El panel inferior muestra el módulo de los coeficientes de Fourier del dato inicial (línea azul) y de la solución numérica para $t = 10$ (línea naranja), en escala logarítmica. De acuerdo a lo esperado, los coeficientes de Fourier no cambian en el tiempo (salvo por una fase) y son reproducidos prácticamente a nivel de precisión de máquina.

Este esquema básico puede generalizarse definiendo otros modelos sobre la base de los ya implementados y/o recurriendo a métodos alternativos de descomposición de operadores.

Algoritmo 4.2 Ejemplo de código para obtener la solución numérica del modelo NLSE3 a partir de un dato inicial de tipo solitón.

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Importa los módulos para la simulación
5 from basis import FourierBasis
6 from state import State
7 from solver import Solver
8 from models import NLSE3Model1D
9 from scheme import AffineSym6
10
11 # Define la base pseudoespectral
12 N = 2**11 # dimensión
13 interval = (-50, 50)
14 fb = FourierBasis(name='fb', dim=N, bounds=interval)
15
16 # Define el estado inicial (solitón de la NLSE3)
17 v = 0.5 # Velocidad del solitón
18 initial_state = lambda x: 1/np.cosh(x) * np.exp(1j*v*x)
19 u0 = State(name='u0', basis=fb, u=initial_state)
20
21 # Crea una instancia del modelo NLSE3 (parámetros por defecto)
22 model = NLSE3Model1D()
23 # Crea una instancia del método afín de orden 6
24 method = AffineSym6()
25 # Crea una instancia del solver
26 solver = Solver(model, method)
27
28 # Define los tiempos de simulación e inicializa el solver
29 t0 = 0
30 t1 = 10
31 solver.start(u0, t0, t1)
32
33 # Punto inicial de la trayectoria
34 trajectory = [(t0, u0)]
35
36 # Bucle principal
37 while solver.active:
38     # Avanza la simulación un paso
39     u = solver.step(dt=1.0e-2)
40     t = solver.sim_time
41     # Almacena los puntos de la trayectoria (solución numérica)
42     trajectory.append((t, u))

```

Algoritmo 4.3 Visualización de resultados a partir de la simulación del Algoritmo 4.2.

```

1 # Calcula la solución de referencia (analítica) sobre la grilla discreta
2 x = u0.grid # Grilla de la discretización espacial
3 omega = (v**2 - 1) / 2 # frecuencia angular del solitón
4 ref_sol = 1/np.cosh(x - v*t1) * np.exp(1j*(v*x - omega*t1))
5
6 # Grafica el módulo los estados inicial y final
7 ROI = (x<15) & (x>-15) # Región de interés para graficar
8 plt.plot(x[ROI], np.abs(u0.values[ROI]), x[ROI], np.abs(u.values)[ROI])
9
10 # Grafica el valor absoluto del error del estado final en escala logarítmica
11 plt.plot(x, np.log10(np.abs(ref_sol - u.values)))
12
13 # Grafica los coeficientes de Fourier de los estados inicial y final
14 from scipy.fft import fftfreq, fftshift
15 # Calcula el vector de números de onda k
16 k = 2*np.pi * fftshift(fftfreq(N, np.abs(interval[1] - interval[0]) / N))
17 plt.plot(k, fftshift(np.log10(np.abs(u0.coefs))),
18          k, fftshift(np.log10(np.abs(u.coefs))))

```

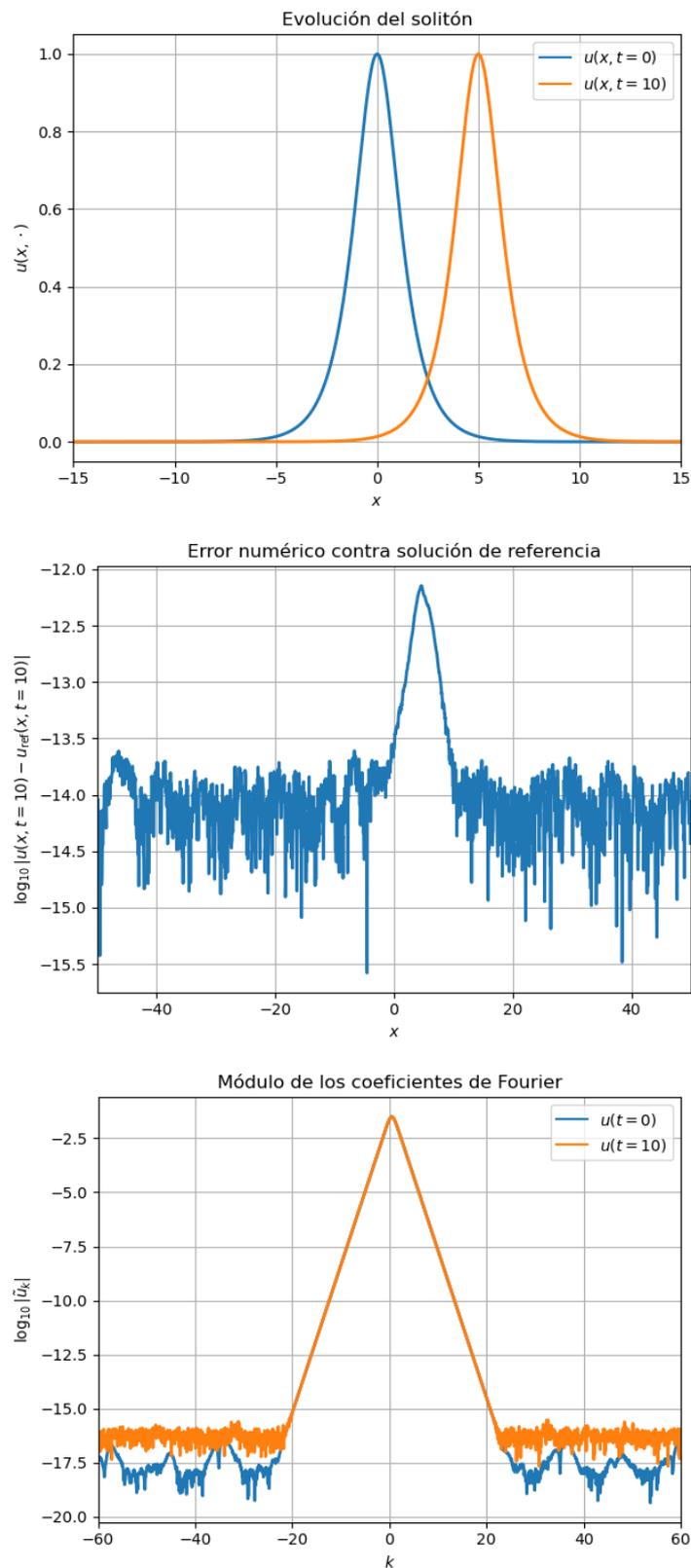


Figura 4.1: Salida gráfica del Algoritmo 4.3. (Arriba) Módulo de la solución numérica para $t = 0$ (línea azul) y para $t = 10$ (línea naranja), en función de x . (Centro) Valor absoluto del error de la solución numérica a tiempo $t = 10$ respecto de la solución analítica de referencia, en función de x (la escala vertical es logarítmica). (Abajo) Módulo de los coeficientes de Fourier de la solución numérica (en escala logarítmica) en función del número de onda k , para $t = 0$ (línea azul) y $t = 10$ (línea naranja).

Parte II

Resultados y análisis

Resumen

En esta Parte de la tesis exponemos los *resultados obtenidos* al tratar numéricamente un conjunto de problemas de evolución contemplados dentro de los modelos discutidos en el Capítulo 2 mediante los métodos numéricos presentados en el Capítulo 3 e implementados en el Capítulo 4.

El énfasis está puesto en la *evaluación del desempeño* de los esquemas de descomposición de operadores introducidos en la Sección 3.2, especialmente el de los esquemas que hemos denominado *métodos afines*, tarea que no había sido emprendida hasta el momento y constituye uno de los aportes principales de nuestro trabajo. Para ello, en el Capítulo 5 estudiamos la *exactitud* y el *costo computacional* de estos métodos en diversos ejemplos, contrastando los resultados con los obtenidos mediante los tradicionales integradores geométricos basados en descomposiciones multiplicativas. En los casos donde resulta pertinente, evaluamos la *conservación numérica de invariantes* de la dinámica.

En el Capítulo 6 analizamos la posibilidad de *incrementar la eficiencia de los métodos afines* incorporando técnicas de *adaptatividad temporal* no contempladas en la propuesta original. Complementariamente, comparamos los resultados obtenidos mediante esta optimización con los proporcionados por pares embebidos de esquemas multiplicativos diseñados con el mismo fin y publicados muy recientemente.

Del análisis de los resultados que surgen de la exhaustiva experimentación numérica, se desprende que los métodos afines de alto orden son sumamente *eficientes y exactos*, con un *rendimiento equivalente o superior* al de los correspondientes esquemas multiplicativos, tanto en la solución de problemas hamiltonianos –caso ejemplificado por la ecuación de Schrödinger no lineal–, como en problemas irreversibles representados por la ecuación compleja de Ginzburg–Landau en sus diversas variantes. Estos resultados apuntalan las ventajas de los métodos afines discutidas oportunamente y sugieren la utilización de los métodos afines como integradores basados en *splitting* de propósito general.

En el Capítulo 7 presentamos las conclusiones de nuestro trabajo y proponemos potenciales extensiones de los métodos investigados.

Capítulo 5

Desempeño de métodos de descomposición

Como fuera discutido en el Capítulo 3, el trabajo de [De Leo et al. \(2016\)](#) introduce esquemas de descomposición de operadores de alto orden basados en combinaciones afines de integradores de *Lie-Trotter* diseñados para evitar los pasos negativos de los tradicionales integradores multiplicativos de orden superior a dos ([Goldman & Kaper, 1996](#); [Blanes & Casas, 2005](#)). En consecuencia, los esquemas afines de alto orden poseen las ventajas del *splitting* y resultan simultáneamente adecuados para problemas irreversibles en los cuales sus análogos multiplicativos pueden manifestar inestabilidad numérica debido al mal planteo del problema para tiempos negativos. Como contrapartida, los métodos afines pierden –a priori– la capacidad de preservar invariantes de la dinámica, propiedad característica de los esquemas multiplicativos ([McLachlan et al., 2002](#); [Hairer et al., 2006](#); [Blanes et al., 2008](#); [Blanes & Casas, 2017](#)).

En [De Leo et al. \(2016\)](#) se explicitan las condiciones que deben satisfacer el dato inicial y los operadores para garantizar la convergencia de los métodos, cuyo orden se prueba rigurosamente. Sin embargo, salvo por el puñado de experimentos numéricos allí incluidos para ejemplificar el orden de convergencia teórico, el desempeño de los métodos afines no es evaluado en términos de exactitud y eficiencia, especialmente en relación a la preservación de invariantes. En las siguientes secciones exponemos los resultados de dicha evaluación en un amplio espectro de problemas relacionados a los modelos de interés.

5.1. Metodología y métricas para la evaluación de desempeño

La evaluación del desempeño de cualquier algoritmo numérico requiere el establecimiento de *métricas* que permitan cuantificar los aspectos a evaluar. En este trabajo estamos interesados en determinar la *exactitud*, la *conservación de invariantes*, el *costo computacional* y la *eficiencia* de los métodos introducidos en el Capítulo 3 al aproximar la solución de problemas de valores iniciales vinculados a los modelos del Capítulo 2.

Exactitud. La exactitud puede cuantificarse mediante el *error* \mathcal{E} de la solución numérica aproximada $u_{\text{num}}(x, t)$ con respecto a una solución de referencia $u_{\text{ref}}(x, t)$ del problema. Definimos dicho error en una norma $\|\cdot\|$ conveniente mediante

$$\mathcal{E}(t) = \|u_{\text{num}}(x, t) - u_{\text{ref}}(x, t)\|. \quad (5.1)$$

En general, calcularemos el error en la norma de $L^\infty(\mathbb{R})$, denotado como $\mathcal{E}_\infty(t)$. La solución numérica será más exacta cuanto menor sea el error \mathcal{E}_∞ .

Conservación de invariantes. Para medir el grado en que los métodos analizados logran preservar los invariantes de la dinámica (cuando el modelo admite alguno), definimos el *error relativo* asociado a la cantidad conservada Q como

$$\epsilon_Q(t) = \left| \frac{Q(t)}{Q(t_0)} - 1 \right|, \quad (5.2)$$

siendo $Q(t_0)$ el valor de dicha cantidad calculado para el dato inicial $u_0(x) = u(x, t_0)$.

Costo computacional. Las unidades mínimas de cómputo de todos los esquemas de descomposición son los propagadores Φ_A y Φ_B asociados a los operadores A y B del problema de valores iniciales, por lo tanto el *costo computacional* \mathcal{C} de un esquema está determinado por el número de evaluaciones E_A y E_B de los propagadores numéricos Φ_A y Φ_B requeridas para calcular la solución numérica a tiempo t . Dado que el tiempo necesario para la evaluación de cada propagador es en general diferente¹, definimos este costo como la suma ponderada

$$\mathcal{C} = \frac{t_A E_A + t_B E_B}{t_A + t_B}, \quad (5.3)$$

siendo t_A y t_B los tiempos necesarios para calcular cada propagador. En general, estos tiempos son altamente dependientes del contexto computacional específico y están relacionados con los detalles de implementación de los algoritmos, la arquitectura de la computadora, el sistema operativo y el entorno de software². Para independizar nuestros resultados de estas particularidades, resulta más útil realizar hipótesis razonables sobre las variables que intervienen en 5.3 y determinar algunas cotas para \mathcal{C} . En primer lugar, se desprende de la definición de los métodos afines que $E_A = E_B$ y por lo tanto su costo computacional resulta

$$\mathcal{C}_{\text{af}} = E_A = E_B.$$

Por otro lado, para los esquemas multiplicativos es posible que una o más etapas de la composición contengan un coeficiente del par (a_i, b_i) nulo y por lo tanto $E_A \neq E_B$, como sucede con

¹Para los modelos investigados, el propagador lineal es en general el más costoso, ya que se implementa como una multiplicación matriz-vector con complejidad $\mathcal{O}(N^2)$ en el método pseudoespectral de Hermite, o como una FFT con complejidad $\mathcal{O}(N \log_2 N)$ en el método pseudoespectral de Fourier, siendo N el tamaño de la base de funciones.

²En un entorno de cómputo determinado, estos tiempos podrían obtenerse por métodos estadísticos.

los métodos de Strang, Neri y Yoshida de orden 6. Por lo tanto, es razonable y económico implementar el esquema correspondiente de tal modo que el propagador que insume más tiempo sea el menos evaluado. Supongamos entonces que $t_A > t_B$, y por lo tanto $E_A < E_B$. El costo computacional 5.3 en este caso puede escribirse como

$$C_{\text{mul}} = E_A \frac{1 + r \frac{E_B}{E_A}}{1 + r},$$

donde hemos definido $r = t_B/t_A$. Si $t_A \gg t_B$ resulta $r \gtrsim 0$ y $C_{\text{mul}} \gtrsim E_A$. En el otro extremo, si $t_B \lesssim t_A$ tenemos $r \lesssim 1$ y $C_{\text{mul}} \approx \frac{1}{2}(E_A + E_B)$. Dado que $C_{\text{mul}}(r)$ es una función creciente, resulta

$$E_A < C_{\text{mul}} < \frac{1}{2}(E_A + E_B).$$

Para los esquemas multiplicativos mencionados, estas acotaciones son

- Strang–Marchuk: $E_B = 2E_A \implies E_A < C < \frac{3}{2}E_A$;
- Neri: $E_B = \frac{4}{3}E_A \implies E_A < C < \frac{7}{6}E_A$;
- Yoshida 6: $E_B = \frac{8}{7}E_A \implies E_A < C < \frac{15}{14}E_A$.

Puede observarse que para los esquemas multiplicativos considerados la diferencia entre la cota inferior y la superior se vuelve marginal a medida que aumenta el orden del método. Por simplicidad, al momento de estimar el costo computacional de los esquemas multiplicativos consideraremos el caso más favorable, esto es, el límite inferior en las acotaciones anteriores $C_{\text{mul}} = E_A$. Esto significa que el costo de estos esquemas será en general subestimado, especialmente para el método de Strang–Marchuk.

Eficiencia. La *eficiencia* de un método está relacionada con el costo computacional requerido para alcanzar una exactitud dada. Diremos que un método \mathcal{M}_1 es *más eficiente* que otro \mathcal{M}_2 para un *nivel de error* \mathcal{E} si demanda menor costo computacional para alcanzar dicho error en la solución numérica del mismo problema. De esta forma, la eficiencia relativa entre dos métodos \mathcal{M}_1 y \mathcal{M}_2 depende del error \mathcal{E} que se desee alcanzar. Si \mathcal{M}_1 es más eficiente que \mathcal{M}_2 para todos los niveles de error de interés, diremos que \mathcal{M}_1 es *más eficiente* que \mathcal{M}_2 .

5.2. Experimentos numéricos

En lo que sigue, exponemos y analizamos un conjunto de experimentos numéricos orientados a evaluar el desempeño de los métodos investigados mediante las métricas y criterios recién introducidos. Para ello, resolvemos problemas de valores iniciales de la forma 2.1 para distintas instancias de los modelos del Capítulo 2. Procuramos, de este modo, explorar el comportamiento de los esquemas numéricos en problemas tanto *hamiltonianos* y *reversibles* como *disipativos* e *irreversibles*. Esto nos permite caracterizar la calidad de los métodos afines a la hora de preservar las constantes de movimiento en aquellos modelos que las poseen así como

analizar la estabilidad de los métodos multiplicativos de alto orden en problemas que resultan mal planteados cuando se invierte el sentido temporal. Los resultados obtenidos dan cuenta de la eficacia de los métodos propuestos para la resolución precisa y eficiente de los modelos investigados, que como fuera explicitado en el Capítulo 2 poseen importancia intrínseca como descripciones de diversos fenómenos de interés científico y tecnológico. Adicionalmente, estudiamos modelos fraccionarios que son objeto de estudio contemporáneo en problemas de óptica no lineal, mecánica cuántica fraccionaria y difusión anómala, y que presentan desafíos teóricos y experimentales aún no resueltos. Consideramos que las herramientas computacionales elaboradas en este trabajo constituyen un aporte útil para el estudio de estos problemas.

Discretización espacial. Realizamos la discretización de funciones y operadores en la variable espacial utilizando tanto el método pseudoespectral de Hermite sobre la recta \mathbb{R} como el método de Fourier sobre un dominio $I = [-L, L] \subset \mathbb{R}$ suficientemente amplio, cuyos detalles teóricos se dieron en la sección 3.3 del Capítulo 3 y cuya implementación se discutió en el Capítulo 4. Recurrimos preferentemente a una u otra representación a la hora de mostrar los resultados para evitar redundancia, dado que son cuantitativamente similares y conducen a idénticas conclusiones.

Esquemas de descomposición. Los esquemas de descomposición que evaluamos y comparamos son los métodos afines simétricos de orden 2, 4 y 6, identificados como `affineS2`, `affineS4` y `affineS6`; y los esquemas multiplicativos del mismo orden etiquetados como `strang`, `neri` y `yoshida6`. Aunque la bibliografía reporta el desarrollo de esquemas multiplicativos de orden superior a 6, su uso es excepcional debido a su elevado costo computacional y por lo tanto no incluimos comparaciones con métodos aditivos simétricos de orden 8 o superior. Sin embargo, estos últimos son implementables con la misma facilidad de los esquemas afines de orden inferior y son sumamente eficientes, como se discute en el Capítulo 6.

5.2.1. Ecuación de Schrödinger no lineal cúbica (NLSE3)

La NLSE3 fue presentada en la Sección 2.2 como modelo para la propagación de paquetes de onda cuasimonocromáticos en medios dispersivos y débilmente no lineales en ausencia de disipación, con aplicaciones en óptica no lineal, hidrodinámica y física de plasmas. Su carácter integrable la vuelve un banco de prueba ideal para los métodos propuestos, permitiendo evaluar la conservación de invariantes a nivel numérico. Entre las infinitas cantidades conservadas, nos concentramos especialmente en la *masa* M (ecuación 2.12) y el *Hamiltoniano* H (ecuación 2.13). Para evaluar el desempeño de los distintos métodos, recurrimos a soluciones de referencia dadas por expresiones analíticas exactas. Concretamente, estudiamos la evolución del *1-soliton*

$$u_{\text{ref}}(x, t) = \eta \operatorname{sech} [\eta(x - ct - x_0)] e^{i(cx - \omega t + \phi_0)}, \quad (5.4)$$

donde x_0 y ϕ_0 representan el centro de masa del solitón y su fase a $t = 0$, η es la amplitud y c la velocidad, con $\omega = (c^2 - \eta^2)/2$ (Sulem & Sulem, 1999; Al Khawaja & Al Sakkaf, 2019). Para el

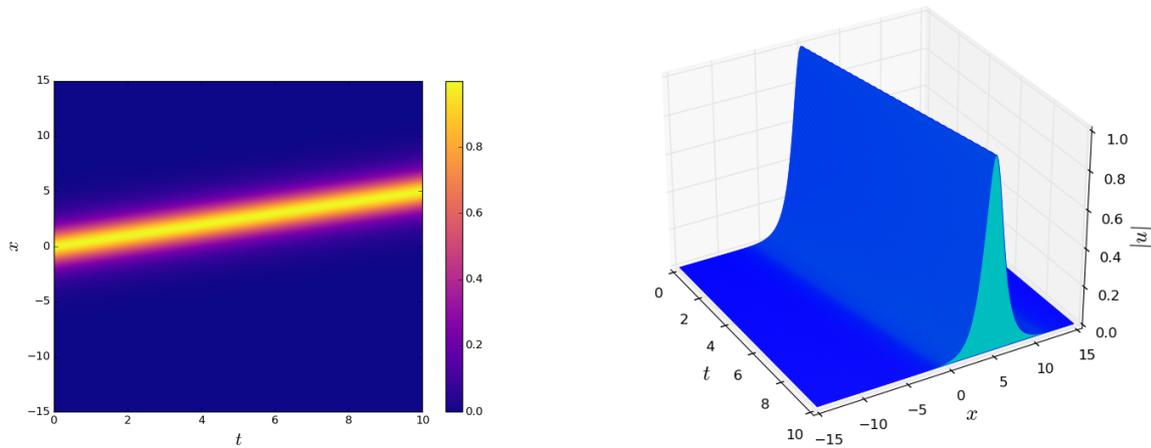


Figura 5.1: (Izquierda) Mapa de color para el módulo de la solución calculada por el método aditivo simétrico de orden 6 (*affineS6*) con tamaño de paso $\Delta t = 0,025$. (Derecha) Evolución del módulo del solitón entre $t = 0$ y $t = 10$.

primer ejemplo numérico seleccionamos los valores $\eta = 1$, $c = 0,5$ y $x_0 = \phi_0 = 0$, por lo que el dato inicial del problema es

$$u_0(x) = \operatorname{sech}(x) e^{i\frac{1}{2}x}.$$

A título de ejemplo, mostramos en la Figura 5.1 el módulo de la solución numérica obtenida mediante el método aditivo simétrico de orden 6 (*affineS6*) entre $t = 0$ y $t = 10$ con un tamaño de paso $\Delta t = 0,025$. Tal como esperado, el perfil avanza con velocidad $c = 0,5$ sin alterar su forma y el centro de masa se desplaza desde $x = 0$ hasta $x = 5$. En este ejemplo, realizamos la discretización de funciones y operadores mediante el método pseudoespectral de Fourier con $N = 2^{11}$ modos sobre el intervalo $I = [-50, 50]$. La solución resulta bien representada en el dominio de interés ya que decae exponencialmente rápido en x y su valor es despreciable en los extremos del intervalo para $t \in [0, 10]$. Además es infinitamente suave y en consecuencia el método de Fourier proporciona convergencia *espectral* (Boyd, 2000; Shen et al., 2011).

Para evaluar el comportamiento general de los métodos según la discretización pseudoespectral utilizada, mostramos en la Figura 5.2 el error $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ de la solución numérica al final de una evolución obtenida mediante los distintos métodos de descomposición con tamaño de paso fijo $\Delta t = 0,025$, en función del tamaño N de la base de Fourier (panel izquierdo) y de Hermite (panel derecho). En ambos casos, observamos que el error rápidamente alcanza un valor de saturación independiente de N (región de la gráfica donde las curvas son aproximadamente horizontales), expresando que a partir de ese punto el error global está dominado por el error del esquema de integración temporal o bien por la acumulación de errores de redondeo, pero no por el error de discretización. Esto es consecuencia de la ya mencionada *convergencia espectral* o *exponencial* de los métodos pseudoespectrales para funciones altamente regulares, como es el caso de la solución del ejemplo analizado (Boyd, 2000; Canuto et al., 2007; Shen et al., 2011). Puede observarse que, con la excepción del método de segundo orden, los esquemas

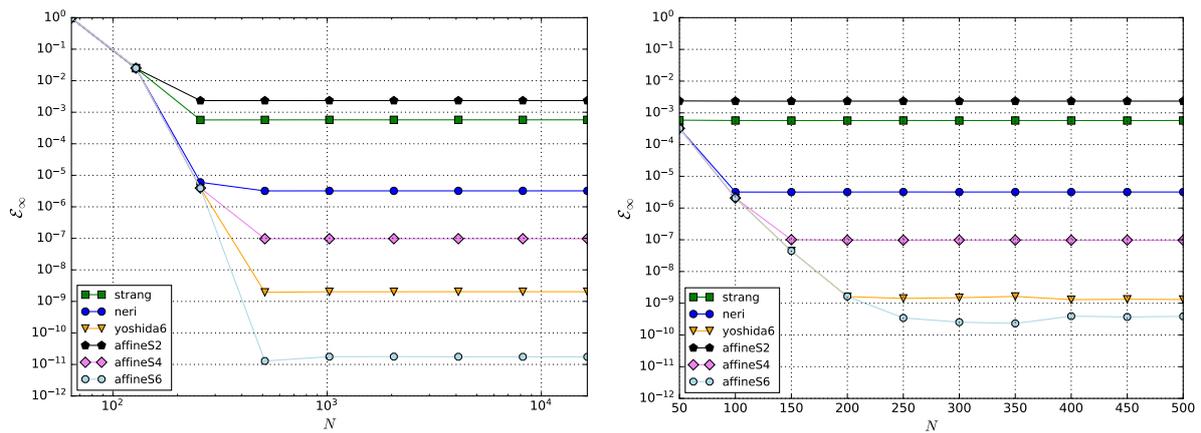


Figura 5.2: (Izquierda) Error absoluto \mathcal{E}_∞ a $t = 10$ en función del tamaño de la base pseudoespectral de Fourier $N = 2^m$, $m = 6, \dots, 14$ (en escala doble logarítmica) para varios esquemas de descomposición. El intervalo de la base de Fourier es $I = [-50, 50]$. (Derecha) Error $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ como función de la dimensión de la base de Hermite (la escala horizontal es lineal). El parámetro de escala es $s = 1,25$. En ambos casos, el error se calcula respecto de la solución exacta de referencia (5.3) con parámetros $\eta = 1,0$, $c = 0,5$, $\phi_0 = x_0 = 0$ y el tamaño de paso es $\Delta t = 0,025$.

afines son más exactos que los multiplicativos para igual valor de N . Para un mismo esquema de descomposición, las curvas alcanzan valores de saturación del mismo orden con ambas discretizaciones, con la excepción del método aditivo de orden 6, para el cual los errores difieren entre ambas figuras en un factor de 10 aproximadamente, siendo inferior para el método pseudoespectral de Fourier. La diferencia puede atribuirse al menor número de operaciones del método de Fourier, cuyo costo crece como $\mathcal{O}(N \log_2 N)$ mientras que el método de Hermite lo hace como $\mathcal{O}(N^2)$. En efecto, vemos que el método de Fourier satura el error a partir de $N \approx 2^{10} = 1024 \approx 10^3$, requiriendo del orden de $1024 \cdot 10 \approx 10^4$ operaciones, mientras que el método de Hermite lo hace para $N \approx 300$ con $9 \cdot 10^4 \approx 10^5$ operaciones. El mayor número de operaciones del método de Hermite eleva el «piso» del error de redondeo, que comienza a ser comparable al error del método de integración temporal más exacto. Hecha esta salvedad, en ambos casos la exactitud alcanzada es notable. En lo que sigue para esta subsección y con el fin de evitar redundancia, mostraremos solamente los resultados obtenidos mediante la discretización de Fourier con la comprensión de que las conclusiones extraídas en nada cambian al utilizar el método de Hermite.

A continuación, analizamos el error absoluto \mathcal{E}_∞ de la aproximación numérica al final de la evolución. En la Figura 5.3 puede apreciarse la exactitud y la eficiencia de los distintos métodos. En el panel izquierdo de la misma se muestra el error \mathcal{E}_∞ en $t = 10$ como función del tamaño de paso de integración Δt para los métodos estudiados. Ambos ejes están en escala logarítmica, por lo que la pendiente de las rectas en la región central de la figura indica el orden de convergencia de cada método y en todos los casos es muy aproximadamente coincidente con el orden de convergencia teórico q , como surge de la mera inspección visual. Para tamaños de paso suficientemente pequeños, el número de operaciones involucradas en el cálculo de la

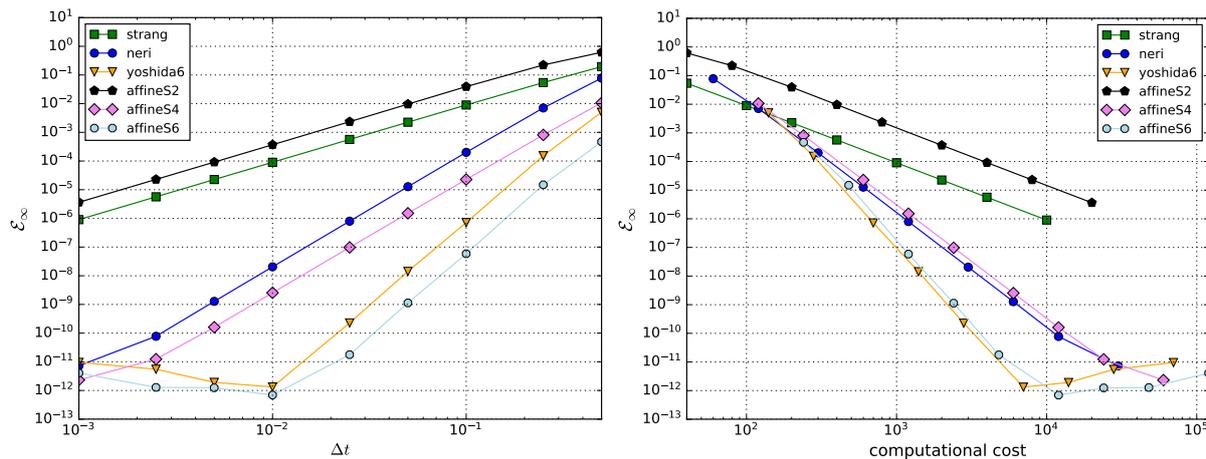


Figura 5.3: (Izquierda) Error absoluto \mathcal{E}_∞ a tiempo $t = 10$ de la solución numérica de la NLSE3, como función del tamaño de paso de integración Δt , para esquemas multiplicativos y afines de orden 2, 4 y 6. (Derecha) Error absoluto $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ en función del costo computacional (gráfico de eficiencia) para los mismos esquemas de descomposición. La solución de referencia es el 1-soliton (5.4) con parámetros $c = 0,5$, $x_0 = \phi_0 = 0$ y $\eta = 1$. Estados y operadores están discretizados mediante el método pseudoespectral de Fourier con $N = 2^{11}$ modos sobre el intervalo $I = [-50, 50] \subset \mathbb{R}$.

solución es lo suficientemente grande como para que el error de redondeo comience a dominar el error total, produciendo el amesetamiento de las curvas que se observa en la zona inferior izquierda, comenzando por los métodos de mayor orden (más costosos). Es notable la elevada exactitud manifestada por todos los métodos de orden superior a 2 para tamaños de paso $10^{-3} \lesssim \Delta t \lesssim 10^{-2}$. En particular, el método aditivo de orden 6 (etiquetado como *affineS6* y representado en la figura mediante la línea de color celeste con círculos) alcanza en $\Delta t \approx 10^{-2}$ el mínimo error $\mathcal{E}_\infty \approx 10^{-12}$ cercano a la precisión de máquina. Con la excepción del método aditivo de orden 2 –levemente superado en esta comparación por el método multiplicativo de Strang–, los métodos afines exhiben mayor exactitud que los métodos multiplicativos del mismo orden para todos los tamaños de paso Δt , con una diferencia en el error de alrededor de un orden de magnitud. Podemos afirmar entonces que los métodos afines de alto orden son *más exactos* que los correspondientes multiplicativos para idéntico tamaño de paso. Por otra parte, el *gráfico de eficiencia* mostrado en el panel derecho de la misma figura, que representa el error \mathcal{E}_∞ en función del número de evaluaciones de los propagadores numéricos, pone de manifiesto que los métodos afines de orden 4 y 6 demandan un costo computacional similar al requerido por los correspondientes esquemas multiplicativos. Cabe recordar además que el costo computacional de estos últimos, en particular del método de Strang, puede estar siendo subestimado, con lo que las diferencias mostradas en la figura podrían ser aún más favorables a los esquemas afines. De lo anterior concluimos que los métodos afines de alto orden son *tan eficientes como los correspondientes multiplicativos*, a pesar de no aprovechar ninguna optimización adicional como adaptatividad temporal o paralelización³. En particular, el esquema aditivo de orden 6 exhibe

³Veremos en el Capítulo 6 que la introducción de adaptatividad temporal inclina la balanza en favor de los

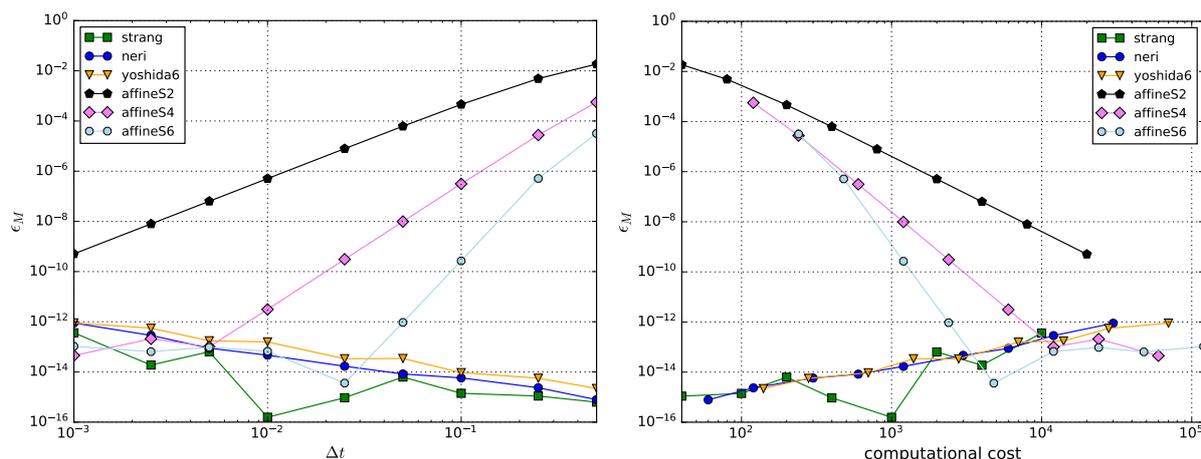


Figura 5.4: (Izquierda) Error relativo en el cálculo de la masa ϵ_M en $t = 10$ como función del tamaño de paso Δt para diferentes esquemas de descomposición. (Derecha) Error relativo ϵ_M como función del costo computacional. Los parámetros son los mismos de la Figura 5.3.

un excelente desempeño en todo el espectro de parámetros explorados.

Luego investigamos el aspecto complementario de la *conservación numérica de invariantes dinámicos*, en particular la masa M y el Hamiltoniano H . Con este fin, en el panel izquierdo de la Figura 5.4 graficamos el error relativo ϵ_M en el tiempo final de la simulación $t = 10$ como función del tamaño de paso Δt . Dado que cada propagador numérico parcial preserva la masa M con gran exactitud, los esquemas multiplicativos son en este aspecto superiores a los aditivos por su propia construcción, estableciendo la cota inferior del error para todo el rango de Δt explorados. El esquema de Strang (línea verde con símbolos cuadrados en la figura) es en este sentido el más exacto debido al menor número de operaciones por paso, seguido por los métodos de Neri (línea azul con círculos) y Yoshida (línea amarilla con triángulos). Puede apreciarse el aumento aproximadamente lineal del error relativo ϵ_M de los métodos multiplicativos con la disminución del tamaño de paso Δt , debido a la acumulación de errores de redondeo. Sin embargo, los métodos afines de orden 4 y 6 alcanzan aproximadamente el mismo nivel de error relativo que los multiplicativos $\epsilon_M \approx 10^{-13}$ (cerca a la precisión de máquina) para $\Delta t \approx 10^{-2}$, esto es, para tamaños de paso con los que también minimizan el error \mathcal{E}_∞ . En términos prácticos, esto significa que a partir de un tamaño de paso moderado los esquemas aditivos de alto orden son superiores a los multiplicativos en términos del error numérico de la solución, y son tan exactos como éstos desde el punto de vista de la conservación de la masa M , en tanto los cálculos se realicen en aritmética de doble precisión. Para un punto de vista complementario, el panel de la derecha de la misma figura muestra el error relativo ϵ_M en función del costo computacional. Se observa que a partir de un cierto costo computacional mínimo (correspondiente al tamaño de paso Δt en el que esquemas aditivos y multiplicativos alcanzan exactitud similar) los métodos afines son tan eficientes como los multiplicativos. El esquema `affineS6` es particularmente competitivo a partir de este punto.

esquemas afines.

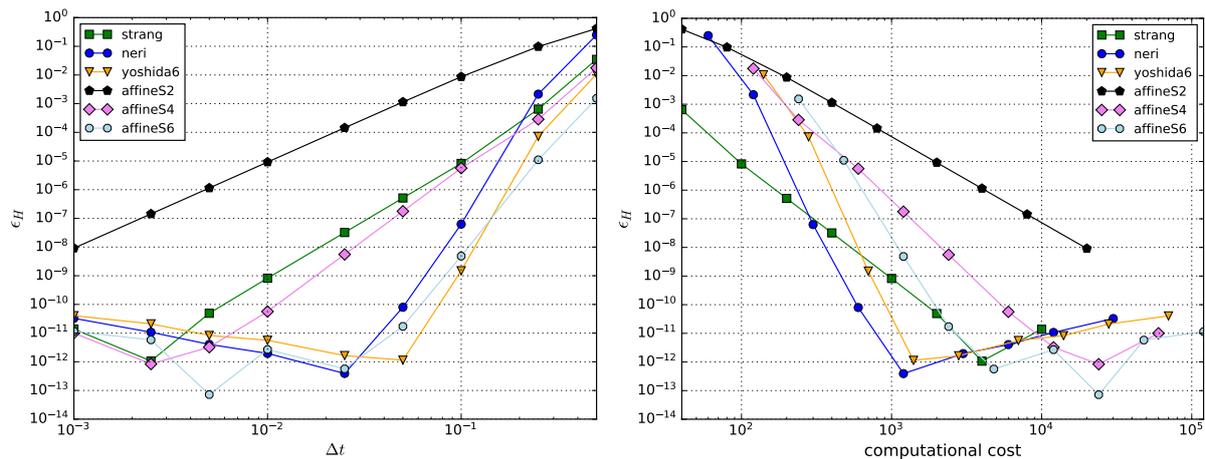


Figura 5.5: (Izquierda) Error relativo en el cálculo del Hamiltoniano ϵ_H en $t = 10$ como función del tamaño de paso Δt para diferentes esquemas de descomposición. (Derecha) Error relativo ϵ_H vs. costo computacional. Los parámetros son los de la Figura 5.3.

En la Figura 5.10 mostramos resultados para el error relativo ϵ_H del Hamiltoniano a tiempo $t = 10$. Se observa que los métodos multiplicativos son superiores en este aspecto. En el panel izquierdo observamos dicho error en función del tamaño de paso, mientras que en el panel derecho se muestra el gráfico de eficiencia. El método de Neri es el más eficiente en general si se desea elevada exactitud, seguido por el método de Yoshida de orden 6. Dentro de los métodos afines, el método de orden 6 es el más eficiente, alcanzando una exactitud máxima para $\Delta t \approx 0,025$.

Para evaluar las características de los métodos afines respecto a la preservación de invariantes a tiempos largos, estudiamos a continuación la evolución del error de dichos invariantes hasta $t = 10^5$. Para ello, mostramos en la Figura 5.6 el error relativo de la masa (panel izquierdo) y del Hamiltoniano (panel derecho) en función del tiempo t , para distintos esquemas de descomposición. En este experimento, el intervalo es $I = [-50\pi, 50\pi]$ y la velocidad del solitón es $c = 0,001$ para garantizar que el soporte numérico de la solución se encuentre dentro de los límites del intervalo I para todo t . El tamaño de paso Δt elegido para cada esquema es tal que el costo computacional $\mathcal{C} \approx 4,8 \times 10^7$ resulta el mismo para todos ellos. En el panel izquierdo, observamos que el error relativo de la masa ϵ_M crece en forma aproximadamente lineal para todos los esquemas debido a la acumulación de errores de redondeo. Los esquemas multiplicativos exhiben un comportamiento prácticamente idéntico con errores muy bajos, compatible con el hecho de ser composiciones de etapas que preservan la masa (salvo por errores de discretización espacial y redondeo). Los mismos superan claramente a los métodos afines de orden 2 y 4, que no poseen esta propiedad. Sin embargo, el método afín de orden 6 produce el menor error con la mayor eficiencia a pesar de no estar construido para preservar la masa. Paralelamente, el panel derecho muestra el comportamiento del error relativo del Hamiltoniano ϵ_H . Desde el punto de vista teórico, se espera que los esquemas multiplicativos produzcan un error acotado superiormente y que esta cota disminuya con el orden del método y el tamaño de paso (Sanz-Serna & Calvo, 1994; Hairer et al., 2006; Blanes & Casas, 2017). Sin embargo, la figura muestra

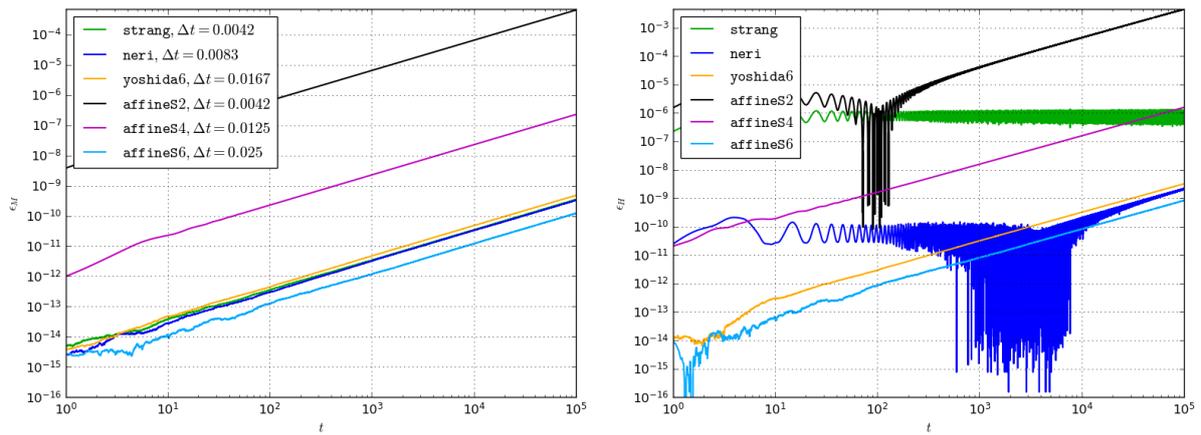


Figura 5.6: (Izquierda) Evolución a tiempos largos del error relativo en la masa $\epsilon_M(t)$, para los esquemas de descomposición y tamaños de paso indicados. (Derecha) Ídem para el error relativo en el Hamiltoniano $\epsilon_H(t)$.

que solo el esquema de Strang–Marchuk se ajusta a esta expectativa teórica, y esto solo puede garantizarse dentro del rango de tiempos explorados. Los esquemas multiplicativos de orden superior exhiben a partir de cierto punto un error que crece linealmente como consecuencia de la acumulación de errores de redondeo, fenómeno particularmente visible para el método de Neri. Esto es, dejan de ser conservativos en la práctica. Nuevamente el método afín de sexto orden resulta el más exacto y eficiente. Por lo tanto, aunque teóricamente los métodos multiplicativos deberían conservar tanto la masa como el Hamiltoniano, en términos prácticos su exactitud resulta condicionada por los límites en la aritmética de punto flotante⁴. En este sentido, puede considerarse al método afín de orden 6 como el más competitivo, con excelentes propiedades de conservación si se tiene en cuenta la precisión numérica de la computadora. Para aprovechar las propiedades teóricas de los esquemas multiplicativos sería necesario recurrir a cálculos de precisión múltiple, computacionalmente más onerosos y sin soporte directo por *hardware* (lo cual podría estar justificado en aplicaciones como simulaciones de alta precisión y tiempos largos en mecánica celeste).

En conclusión, podemos afirmar que el método afín de sexto orden exhibe un desempeño muy competitivo respecto de los multiplicativos en función de todas las métricas evaluadas, logrando elevada exactitud y eficiencia tanto desde el punto de vista de la aproximación numérica de la solución como de la conservación de los invariantes dinámicos que caracterizan al sistema hamiltoniano estudiado.

5.2.2. Ecuación de Schrödinger no lineal fraccionaria (fNLSE3)

La fNLSE3 es una generalización del modelo de la sección anterior que involucra un operador lineal *no local*, el Laplaciano fraccionario. Como la NLSE3, se trata de un modelo reversible

⁴A la fecha, la aritmética de punto flotante de doble precisión (64 bits) es la que tiene soporte generalizado por hardware en distintas arquitecturas de computadoras. El estándar IEEE-754 define la aritmética de cuádruple precisión (128 bits) (IEEE, 2019) pero su soporte es minoritario tanto en hardware como en compiladores.

que conserva la masa y el hamiltoniano pero, a diferencia de aquella, no es completamente integrable y no cuenta con soluciones analíticas conocidas. Como fuera expuesto en el Capítulo 2, este modelo está relacionado con propuestas para una mecánica cuántica fraccionaria, fenómenos de difusión anómala y problemas de óptica; en este último campo han sido propuestos experimentos en cavidades resonantes por Longhi (2015) que han sido muy recientemente realizados, aunque de manera no completamente satisfactoria, por Liu et al. (2023). En esta sección extendemos el estudio de los métodos numéricos a esta variante fraccionaria. Dado que tanto los experimentos numéricos como la metodología de análisis son similares al caso no fraccionario, el énfasis estará puesto en las diferencias de tratamiento.

En primer lugar, la ausencia de soluciones analíticas nos obliga a trabajar con soluciones de referencia numéricas. Es conocido que en el caso *enfocante* la ecuación admite ondas estacionarias de la forma $u_{\text{st}}^\omega(x, t) = \psi(x)e^{i\omega t}$ con $\omega \in \mathbb{R}$, donde $\psi(x)$ es solución de la ecuación no lineal (Klein et al., 2014)

$$\frac{1}{2} (-\partial_x^2)^{\alpha/2} \psi + \omega \psi - |\psi|^2 \psi = 0, \quad (5.5)$$

Utilizamos entonces la onda estacionaria con $\omega = 1$ como solución de referencia $u_{\text{ref}}(x, t) = u_{\text{st}}^1(x, t)$. Dado que no se conocen soluciones exactas para la ecuación (5.5), debemos aproximarlas numéricamente. Para ello, discretizamos la ecuación con el método pseudoespectral y resolvemos el problema finito-dimensional no lineal resultante mediante el método de Newton-Krylov implementado por la librería SciPy, utilizando el *solver* LGMRES (Knoll & Keyes, 2004). Para alcanzar una elevada exactitud, exigimos al algoritmo de optimización una tolerancia máxima para el residuo de 10^{-12} . Usando el método pseudoespectral de Fourier, la experimentación numérica revela que con $N = 2^{15}$ modos sobre un intervalo $I = [-300, 300]$ se logra la tolerancia exigida en un número razonable de iteraciones, siempre que el dato inicial se encuentre suficientemente cerca de la solución, que depende del valor del índice de Lévy $1 < \alpha \leq 2$ (de otro modo, la iteración no converge o lo hace a la solución trivial). Las soluciones para distintos valores de α se obtienen mediante un método de continuación numérica. Esto es, dada una secuencia decreciente de índices de Lévy $2 \geq \alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \dots > \alpha_m > 1$, comenzamos con un dato inicial $\psi_{1,0}(\mathbf{x}) = \sqrt{2} \operatorname{sech}(\sqrt{2}\mathbf{x})$ (onda estacionaria de la NLSE3) y resolvemos el problema para $\alpha = \alpha_1$ obteniendo $\psi_1(\mathbf{x})$. Luego tomamos $\psi_{2,0}(\mathbf{x}) = \psi_1(\mathbf{x})$ como dato inicial para encontrar la solución $\psi_2(\mathbf{x})$ correspondiente a $\alpha = \alpha_2$. Se repite el procedimiento utilizando $\psi_{i+1,0}(\mathbf{x}) = \psi_i(\mathbf{x})$ como dato inicial para encontrar la solución $\psi_{i+1}(\mathbf{x})$ correspondiente a $\alpha = \alpha_{i+1}$, hasta que $i + 1 = m$. La implementación de este procedimiento en Python está dada por el Algoritmo B.1 del Apéndice B.

En el panel superior de la Figura 5.7 se muestra el módulo de las ondas estacionarias $|\psi(\mathbf{x})|$ hallados por el procedimiento descrito, para distintos valores de α . Se observa que la gráfica se estrecha horizontalmente y aumenta su valor máximo a medida que α disminuye. En el panel central de la misma figura vemos el decaimiento espacial asintótico de $|\psi(\mathbf{x})|$ como función de \mathbf{x} en escala *log-log*. Puede apreciarse un decaimiento de tipo algebraico más lento a medida que disminuye α , a excepción del caso $\alpha = 2$ (correspondiente a la NLSE3 no fraccionaria) con decaimiento exponencial. En el panel inferior se muestra el módulo de los coeficientes pseudo-

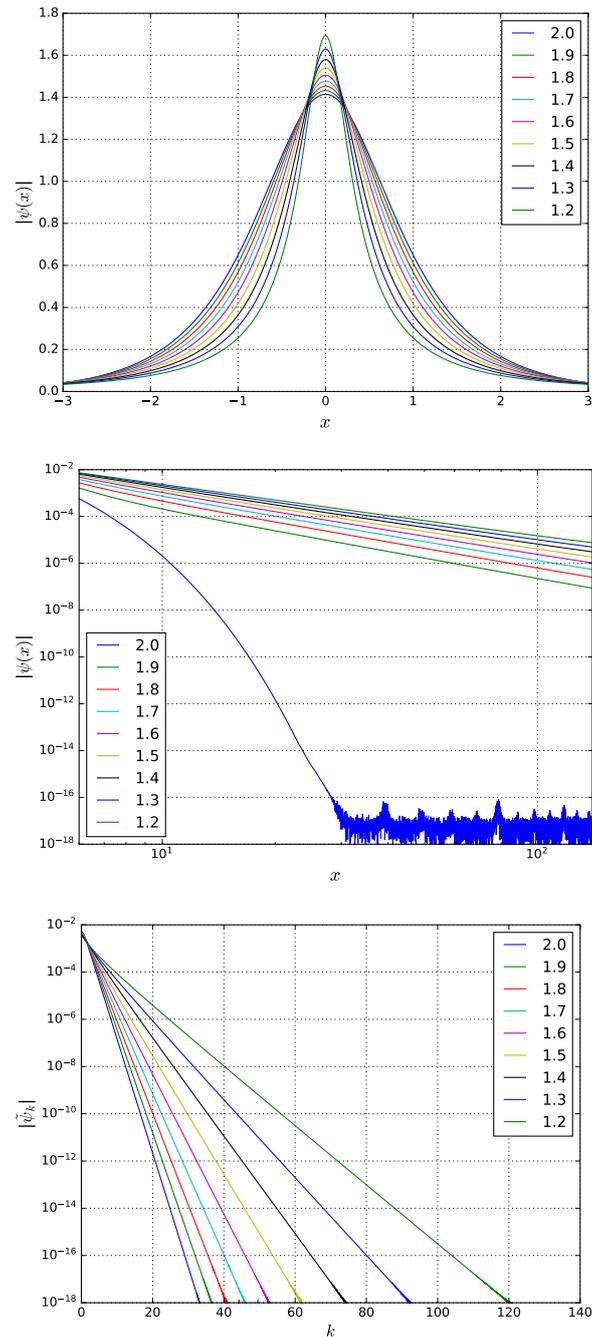


Figura 5.7: (Superior) Módulo $|\psi(x)|$ de las ondas estacionarias de la fNLSE3 obtenidas numéricamente para $\omega = 1$ y distintos índices de Lévy α . (Central) Decaimiento asintótico espacial de $|\psi(x)|$ en escala \log - \log . Cuando $\alpha = 2$ (caso de la NLSE3 no fraccionaria) el decaimiento es exponencial, mientras que para $\alpha < 2$ el decaimiento es algebraico. (Inferior) Módulo de los coeficientes de Fourier $|\tilde{\psi}_k|$ de las ondas estacionarias en escala semilogarítmica, mostrando decaimiento exponencial.

espectrales de Fourier de las ondas estacionarias, en escala semilogarítmica. Es evidente que los mismos decaen exponencialmente y que la tasa de decaimiento es menor para valores menores de α . También surge claramente de la misma figura que la discretización utilizada proporciona una resolución espectral adecuada de las ondas estacionarias para todos los valores de α . Las tasas de decaimiento espacial y espectral observadas indican que para valores decrecientes del índice de Lévy α son necesarios más modos de Fourier y un intervalo más amplio para representar con exactitud las ondas estacionarias mediante el método pseudoespectral, de modo tal que la función resulte adecuadamente resuelta tanto espacial como espectralmente. Conclusiones similares le caben al método pseudoespectral de Hermite, teniendo el factor de escala s un papel importante (Tang, 1993; Ma et al., 2005; Mao & Shen, 2017; Tang et al., 2018).

Considerando las ondas estacionarias recién calculadas como soluciones de referencia, procedemos a continuación a evaluar los métodos de descomposición de manera similar a la sección anterior. Analizaremos en este caso la exactitud y eficiencia de los métodos en el cálculo de la solución numérica del problema y la conservación de los invariantes dinámicos tomando dos valores representativos del índice de Lévy ($\alpha = 1,8$ y $\alpha = 1,3$) para contemplar los efectos de la no localidad.

En los paneles superiores de la Figura 5.8 se muestra el error \mathcal{E}_∞ en $t = 10$ en función del tamaño de paso Δt (izquierda) y del costo computacional (derecha) para la aproximación numérica de un estado estacionario con $\omega = 1$ y $\alpha = 1,8$. Los paneles inferiores muestran la misma información para $\alpha = 1,3$. Observamos que para $\alpha = 1,8$ los resultados son similares al caso no fraccionario. Sin embargo, los métodos afines de alto orden manifiestan mayor estabilidad que los multiplicativos para tamaños de paso grandes cuando $\alpha = 1,3$, observándose una eficiencia similar para tamaños de paso pequeños. En efecto, la experimentación numérica sugiere que esta es la tendencia general al disminuir el valor de α de 2 a 1.

En cuanto a la conservación de la masa, los resultados obtenidos son cualitativamente similares al caso no fraccionario de la sección previa para ambos valores α , como se observa en la Figura 5.9. Esto es, por debajo de un tamaño de paso Δt los métodos afines de alto orden son para todos los fines prácticos tan exactos y eficientes como los multiplicativos. Adicionalmente, se observa que el tamaño de paso requerido para alcanzar esta situación de equivalencia disminuye levemente con la disminución del índice de Lévy α .

La conservación del Hamiltoniano puede analizarse a partir de los gráficos de la Figura 5.10, donde se muestra el comportamiento del error relativo $\epsilon_H(t = 10)$. Mientras que para $\alpha = 1,8$ (arriba) los resultados son similares a los de la NLSE3, para $\alpha = 1,3$ (abajo) se evidencia una mayor inestabilidad de los métodos multiplicativos de alto orden.

A la luz de estos resultados, podemos reafirmar aún en el caso fraccionario el buen desempeño general de los métodos afines de alto orden respecto de los esquemas multiplicativos.

En conclusión, mediante la exhaustiva exploración numérica de la ecuación de Schrödinger no lineal cúbica –tanto en su versión estándar como en una variante fraccionaria–, mostramos el alto grado de exactitud y eficiencia que caracteriza a los métodos afines de alto orden en un terreno tradicionalmente dominado por esquemas multiplicativos. En particular, observamos el excelente desempeño del método aditivo simétrico de orden 6. Esto sugiere considerar a

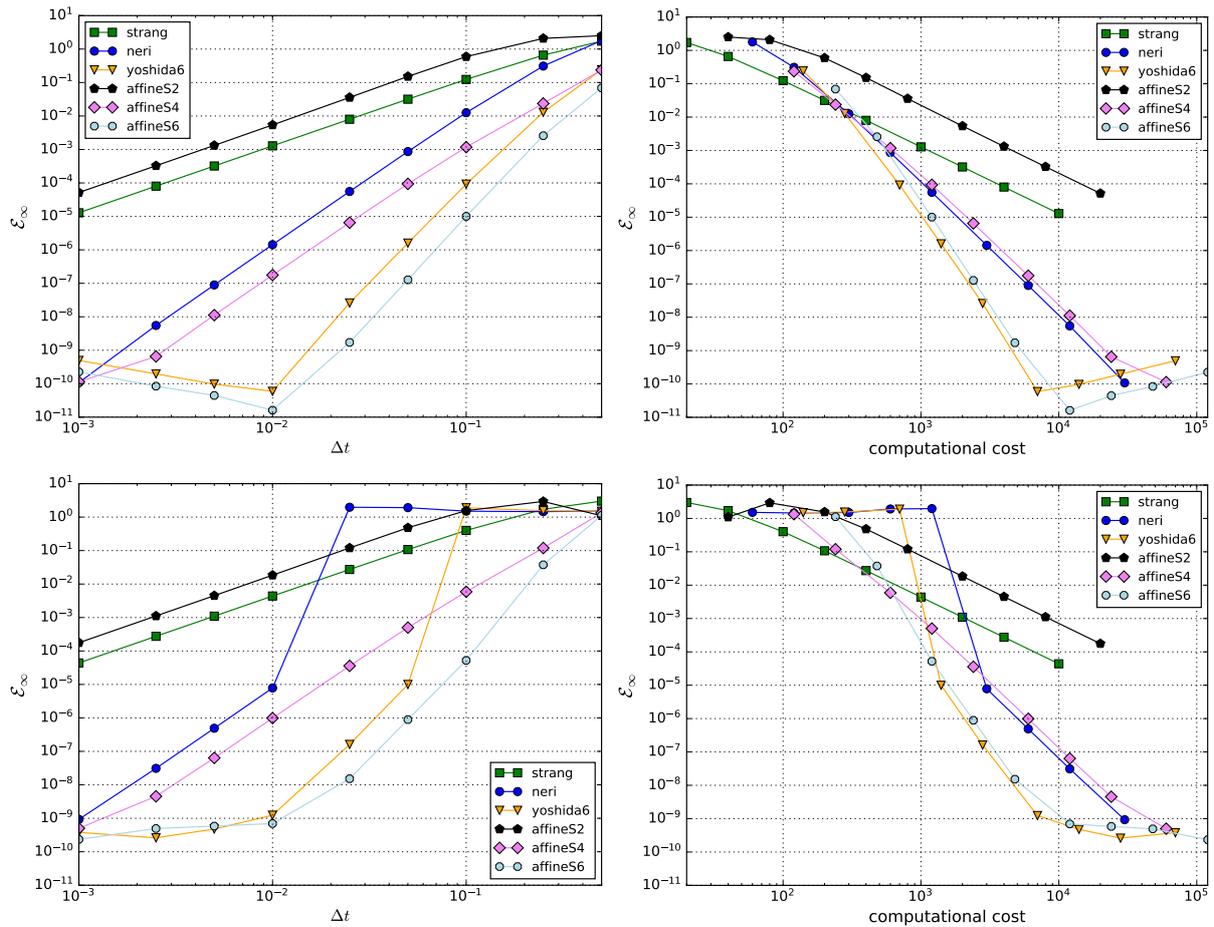


Figura 5.8: (Izquierda) Error absoluto $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ de la solución numérica de la fNLSE3 (caso enfocante) como función del tamaño de paso Δt para distintos métodos de descomposición. (Derecha) Gráfico de eficiencia correspondiente. (Arriba) Resultados para $\alpha = 1,8$. (Abajo) Resultados para $\alpha = 1,3$. La solución de referencia es el estado estacionario de la fNLSE3 con $\omega = 1$ cuya parte espacial $\psi(\mathbf{x})$ es la solución numérica de la ecuación 5.7. La discretización de estados y operadores se obtuvo mediante el método pseudoespectral de Fourier con $N = 2^{15}$ modos sobre el intervalo $I = [-300, 300]$.

los métodos afines de alto orden como integradores basados en descomposición de propósito general.

5.2.3. Ecuación de reacción–difusión de Fisher

Como ejemplo introductorio de una EDP no lineal unidimensional irreversible y no conservativa analizamos la ecuación de reacción–difusión de Fisher. La misma fue introducida por Fisher (1937) como modelo para la propagación de genes. Tiene también aplicación en problemas de difusión de neutrones en reactores nucleares, combustión y dinámica de poblaciones (Sari, 2015). Asume la forma

$$\partial_t u(x, t) = \alpha \partial_x^2 u(x, t) + \beta u(x, t)(1 - u(x, t)), \quad x \in \mathbb{R}, t > 0,$$

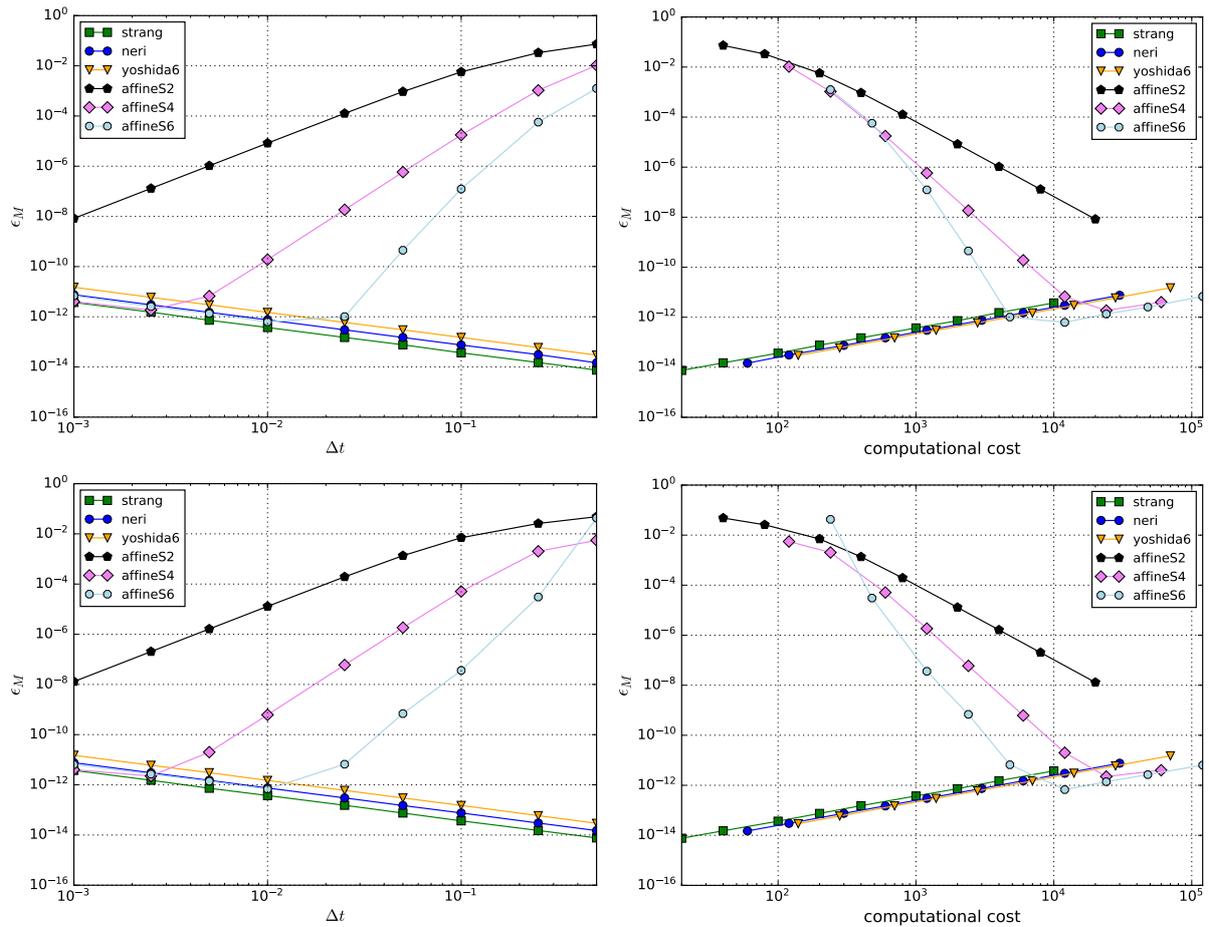


Figura 5.9: (Izquierda) Error relativo de la masa $\epsilon_M(t = 10)$ para la solución numérica de la fNLSE3 como función del tamaño de paso Δt para distintos esquemas de descomposición. (Derecha) Gráfico de eficiencia correspondiente. (Arriba) Resultados para $\alpha = 1,8$. (Abajo) Resultados para $\alpha = 1,3$. Misma solución de referencia que la Figura 5.8.

siendo α un coeficiente de difusión no negativo y β un parámetro real arbitrario. El carácter difusivo de la ecuación plantea un desafío para métodos de descomposición que requieren pasos de tiempo negativos.

Los experimentos numéricos consideran el dato inicial $u_0(x) = \text{sech}^2(10x)$. La solución se aproxima mediante una discretización pseudo espectral de Fourier con $N = 2^{10}$ en el intervalo $I = [-80, 80]$. Los parámetros del modelo para la simulación son $\alpha = 2$ y $\beta = 0,5$. Dado que no se conocen soluciones analíticas para este modelo, recurrimos a una solución numérica de referencia obtenida por el método de Dormand–Prince 8(5,3) descrito en [Hairer et al. \(1993\)](#) e implementado en la librería SciPy. Este es un integrador de Runge–Kutta monopaso explícito de orden 8 que adapta dinámicamente el tamaño de paso para mantener controlada la estimación del error local a partir de cotas definidas por el usuario⁵, que en nuestro caso fijamos para garantizar una exactitud cercana a la precisión de máquina ($\text{rtol} = 2,5 \times 10^{-14}$, $\text{atol} = 10^{-16}$).

⁵Estrategias similares serán utilizadas en el Capítulo 6 para la implementación de métodos de descomposición adaptativos.

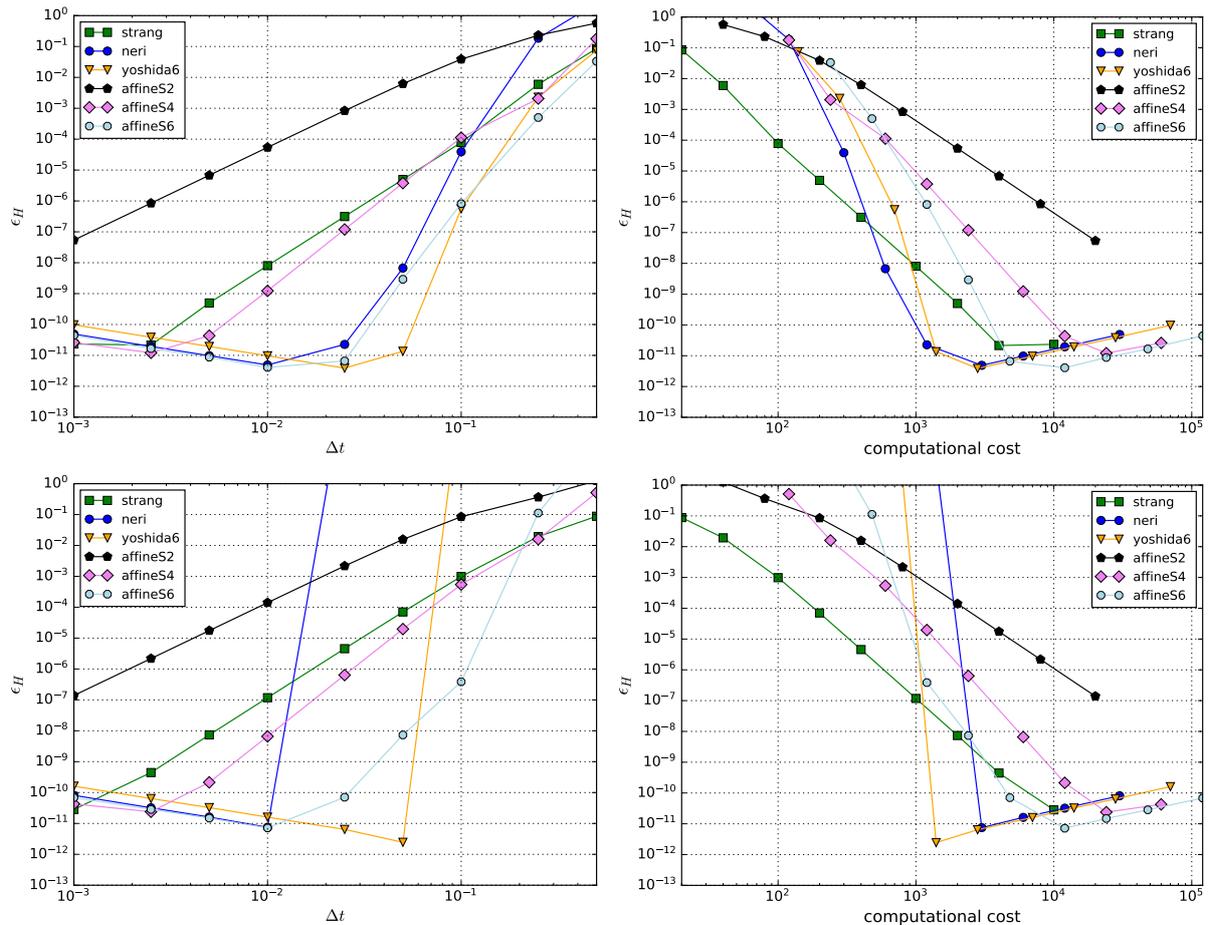


Figura 5.10: (Izquierda) Error relativo del Hamiltoniano $\epsilon_H(t = 10)$ para la solución numérica de la fNLSE3 como función del tamaño de paso Δt para los distintos métodos de descomposición analizados. (Derecha) Gráfico de eficiencia correspondiente. (Arriba) Resultados para $\alpha = 1,8$. (Abajo) Resultados para $\alpha = 1,3$. Misma solución de referencia que la Figura 5.8.

La Figura 5.11 muestra el comportamiento de los distintos esquemas de descomposición en función del tamaño de paso Δt (panel izquierdo) y del costo computacional (panel derecho). Puede observarse que los métodos de descomposición multiplicativos de alto orden manifiestan inestabilidad numérica para tamaños de paso grandes, mientras que los métodos afines presentan un comportamiento numéricamente estable con independencia del tamaño de paso. En términos de eficiencia, métodos de orden equivalente muestran un desempeño similar, con una leve ventaja para los esquemas multiplicativos cuando son estables. Sin embargo, esta diferencia podría disminuirse (incluso invertirse) por medio de optimizaciones como paralelización y adaptatividad temporal (este último aspecto será analizado en el Capítulo 6). Experimentos adicionales (omitidos por brevedad) revelan que la estabilidad de los métodos multiplicativos depende del estado inicial y se deteriora con el aumento del coeficiente de difusión. El método afín de orden 6 garantiza tanto eficiencia como estabilidad cuando se requiere elevada exactitud. La solución numérica obtenida mediante este método con tamaño de paso $\Delta t = 10^{-3}$ para distintos instantes de tiempo $t \in [0, 10]$ se muestra en la Figura 5.12. Observamos, como

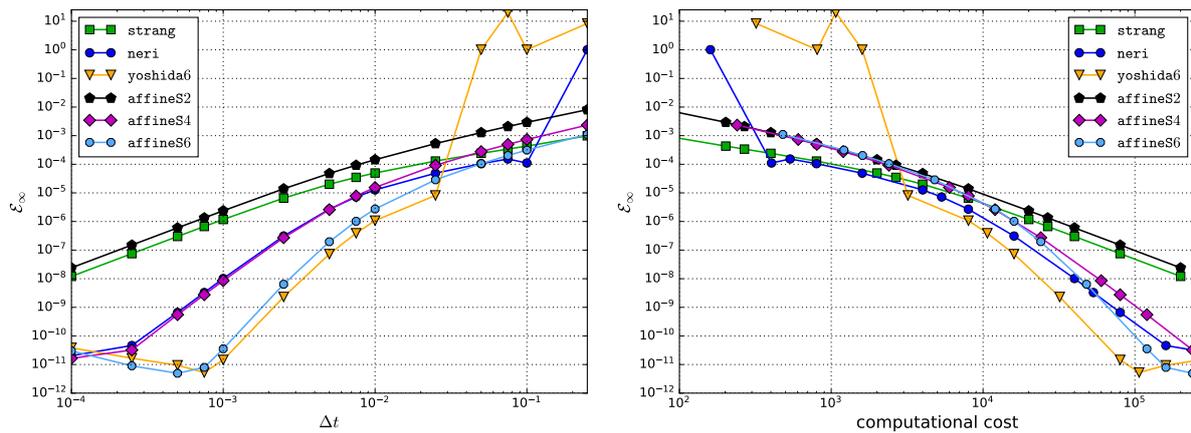


Figura 5.11: (Izquierda) Error absoluto $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ de la solución numérica de la ecuación de Fisher como función del tamaño de paso Δt para distintos esquemas de descomposición. (Derecha) Gráfico de eficiencia. Los parámetros del modelo son $\alpha = 2, \beta = 0,5$. La solución de referencia es la calculada con el método Dormand-Prince 8(5,3) utilizando una discretización mediante el método pseudoespectral de Fourier con $N = 2^{10}$ y $I = [-80, 80]$.

se reporta en [Sari \(2015\)](#), que la solución decrece rápidamente al inicio debido a que el efecto difusivo domina al reactivo. Una vez que el pico de la solución alcanza su mínimo, la reacción se vuelve dominante y el máximo de la solución comienza a crecer.

5.2.4. Ecuación compleja de Ginzburg–Landau (CGLE)

La ecuación compleja de Ginzburg–Landau es una de las ecuaciones no lineales más importantes en Física. En el contexto de los modelos investigados en este trabajo puede considerarse una generalización disipativa de la NLSE que incorpora ganancias y pérdidas lineales y no lineales de energía. En términos más generales, se trata de un modelo universal y canónico para la descripción de la dinámica de sistemas extendidos cerca de la aparición de oscilaciones, con aplicaciones en problemas de reacción–difusión, hidrodinámica, formación de patrones y transiciones de fase ([Aranson & Kramer, 2002](#); [García-Morales & Krischer, 2012](#)). Aunque se trata de un sistema no integrable sin invariantes dinámicos conocidos, [Akhmediev et al. \(1996\)](#) han encontrado soluciones analíticas exactas de tipo solitón. En los experimentos numéricos tomaremos como solución de referencia $u_{\text{ref}}(x, t)$ el estado estacionario (2.17) con parámetros $G = 1, \beta = 0,25$ y $\phi_0 = 0$, cuyos resultados analizamos a continuación.

La Figura 5.13 muestra el error de la solución numérica $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ respecto del solitón de referencia como función del tamaño de paso Δt (panel izquierdo) y en función del costo computacional (panel derecho). En este caso puede observarse no solo la superioridad de los esquemas afines de alto orden sino también la inestabilidad de los esquemas multiplicativos de orden 4 y 6, que se manifiesta en la imposibilidad de calcular la solución numérica para pasos de tiempo $\Delta t \gtrsim 5 \cdot 10^{-2}$ como consecuencia del término difusivo del modelo. En efecto, los experimentos numéricos demuestran dicha inestabilidad se incrementa con el aumento del coeficiente de difusión β .

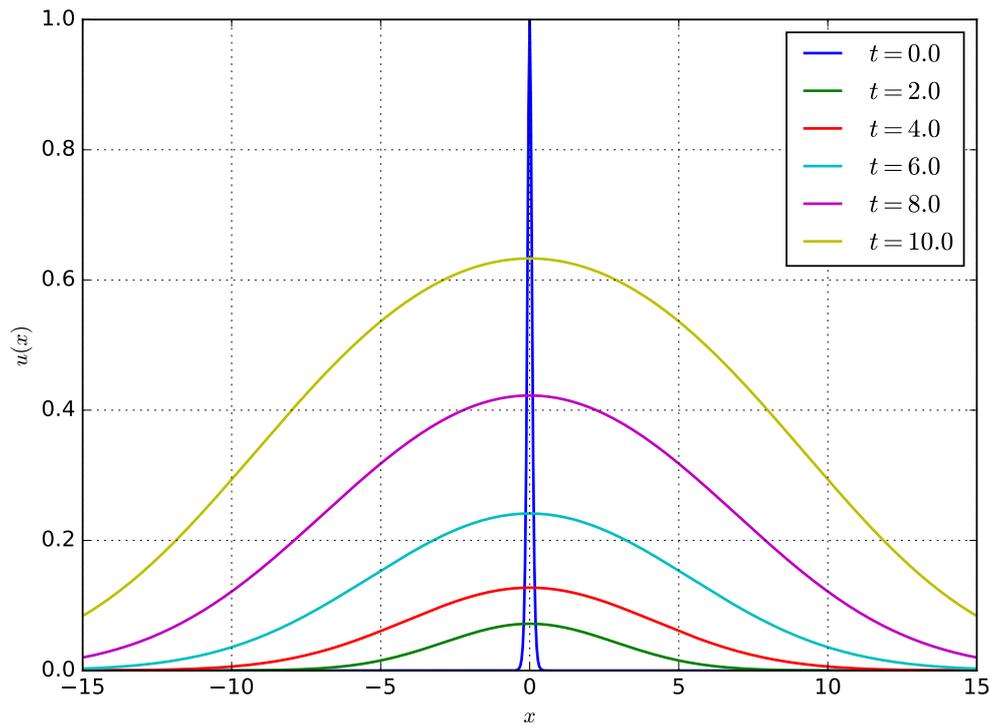


Figura 5.12: Solución de la ecuación de Fisher para distintos valores de t . Los parámetros son los de la Figura 5.11.

5.2.5. Ecuación fraccionaria de Ginzburg–Landau (fCGLE)

Recientemente, al igual que para la NLSE3, se han propuesto variantes fraccionarias de la CGLE cúbico–quintica (Qiu et al., 2020) como modelos no locales que admiten solitones disipativos (Akhmediev & Ankiewicz, 2008; Grelu & Akhmediev, 2012; Ferreira, 2022). Se trata de un campo de investigación con intensa actividad por lo que disponer de métodos numéricos fiables y versátiles es de suma importancia para apuntalar los estudios teóricos y experimentales en curso.

Dado que no disponemos de soluciones analíticas, consideraremos una solución de referencia obtenida mediante el método de Dormand-Prince 8(5,3) como en el ejemplo de la ecuación de Fisher. En el caso cúbico–quintico de la CGLE, el problema parcial no lineal en la descomposición con dos operadores no admite una solución analítica explícita⁶, por lo que el propagador ϕ_B también será aproximado numéricamente utilizando el método de Dormand-Prince 8(5,3) con tolerancias estrictas. De este modo, el orden de convergencia del método de descomposición no resulta «contaminado» por el del método de integración numérica usado en la solución del problema parcial no lineal (cuyo orden es superior al de los esquemas de mayor orden investigados).

Proponemos el dato inicial de tipo gaussiano $u_0(x) = 1,2 e^{-\frac{x^2}{2}}$ y consideramos el modelo

⁶Utilizando una descomposición de tres operadores es posible expresar en forma exacta los flujos debidos a los términos cúbico y quintico por separado, manteniendo la aproximación pseudoespectral para la parte lineal.

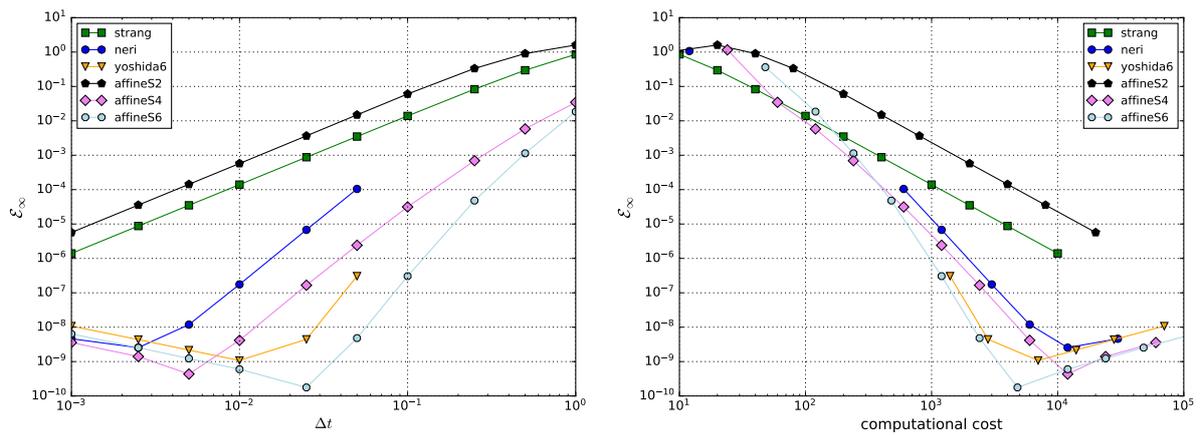


Figura 5.13: (Izquierda) Error absoluto $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ de la solución numérica de la CGLE3 como función del tamaño de paso Δt para distintos esquemas de descomposición. (Derecha) Gráfico de eficiencia. La solución de referencia es el solitón exacto (2.17) con parámetros $G = 1, \beta = 0,25$ y $\phi_0 = 0$. Estados y operadores se discretizaron mediante el método pseudo-espectral de Hermite con $N = 300$ y factor de escala $s = 1$.

fCGLE5 con parámetros $\beta = 0,1, \gamma = -1,0, \delta = -0,2, \varepsilon = 1,7, \nu = -0,115, \mu = -1,0$, para los que Qiu et al. (2020) reportan la convergencia del dato inicial a un solitón disipativo. La Figura 5.14 muestra el error $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ para los distintos métodos de descomposición analizados, en función del tamaño de paso Δt (paneles a la izquierda) y del costo computacional (paneles a la derecha). Los paneles superiores corresponden a un índice de Lévy $\alpha = 1,8$ y los inferiores a $\alpha = 1,1$. Independientemente del valor de α , vemos que los métodos afines de alto orden son más exactos que los correspondientes multiplicativos. En cuanto a la eficiencia, se puede apreciar que los métodos afines y multiplicativos de alto orden son aproximadamente equivalentes, salvo para el caso $\alpha = 1,1$ en que el método de Yoshida de orden 6 es levemente más eficiente. Sin embargo, la experimentación numérica revela que esta ventaja disminuye a medida que $\alpha \rightarrow 2$. Además cabe recordar que, como fuera planteado en la sección 5.1, el costo de los métodos multiplicativos puede estar siendo subestimado, y que los métodos aditivos tienen la potencialidad de incorporar de manera directa mecanismos de optimización como paralelismo y adaptatividad temporal (este tema será objeto de investigación en el Capítulo 6).

Las soluciones numéricas calculadas por el esquema afín de orden 6 y el método pseudo-espectral de Hermite se muestran en la Figura 5.15. Los paneles superiores corresponden a $\alpha = 1,8$ y los inferiores a $\alpha = 1,1$. Los paneles de la izquierda muestran un mapa de color del módulo de la solución para $0 \leq t \leq 250$ a partir del estado inicial gaussiano. Se aprecia que para ambos valores del índice de Levy el módulo de la solución converge a un perfil estacionario correspondiente a un solitón disipativo. Los paneles de la derecha exhiben la evolución del módulo de la solución hasta $t = 30$, de manera de poder apreciar la dinámica inicial previa a la estabilización. Para $\alpha = 1,8$ el ancho del solitón al que converge la solución es mayor y la estabilización se produce más rápidamente, mostrando menos oscilaciones que para el caso $\alpha = 1,1$. La experimentación numérica muestra que la disminución en la extensión del solitón

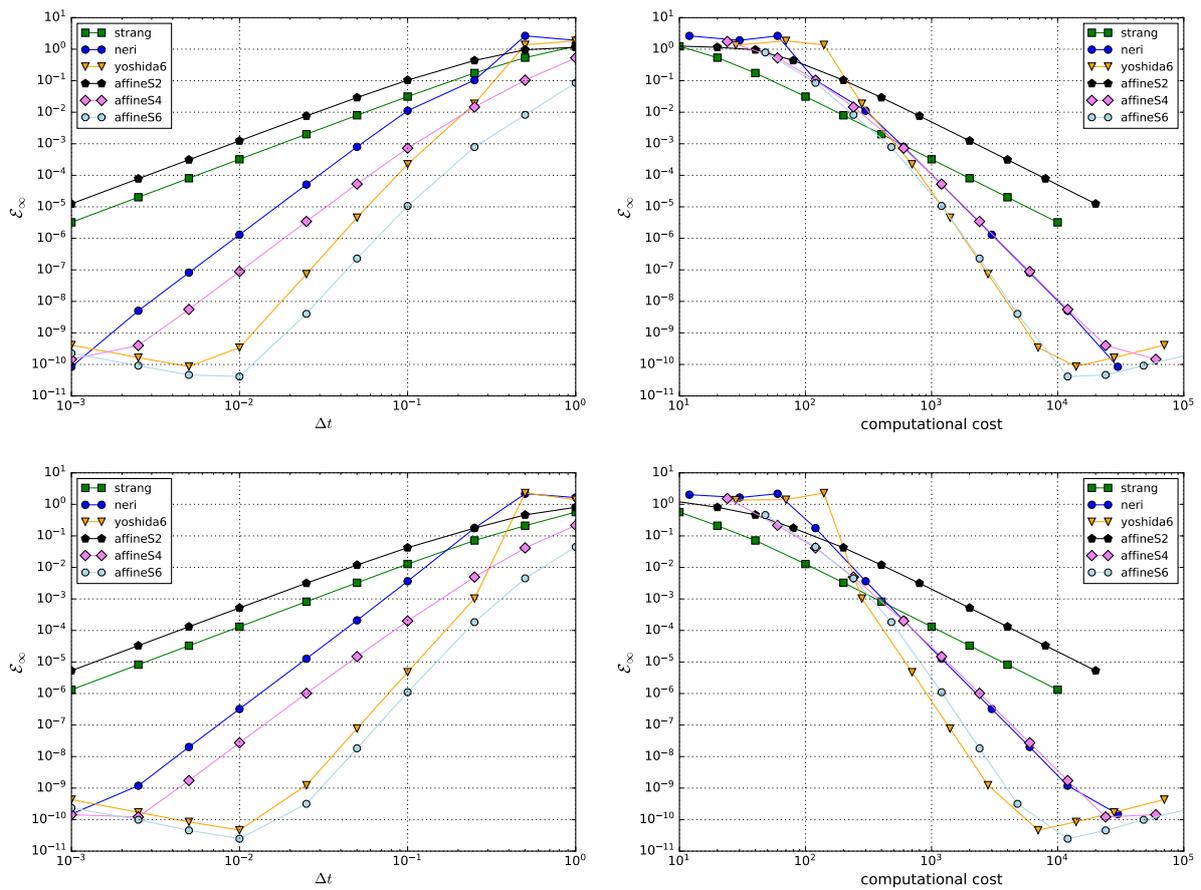


Figura 5.14: (Izquierda) Error absoluto $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ de la solución numérica como función del tamaño de paso Δt para distintos esquemas de descomposición. (Derecha) Gráfico de eficiencia. (Arriba) Resultados para $\alpha = 1,8$. (Abajo) Resultados para $\alpha = 1,1$ Los parámetros del modelo son $\beta = 0,1, \gamma = -1,0, \delta = -0,2, \varepsilon = 1,7, \nu = -0,115, \mu = -1,0$. La solución numérica de referencia se calcula mediante un método Dormand-Prince 8(5,3) con $\text{atol} = 10^{-16}$ y $\text{rtol} = 2,25^{-14}$.

y el incremento en el tiempo de estabilización se dan con continuidad a medida que α disminuye. Estos resultados cualitativos, no reportados previamente, complementan los obtenidos por [Qiu et al. \(2020\)](#).

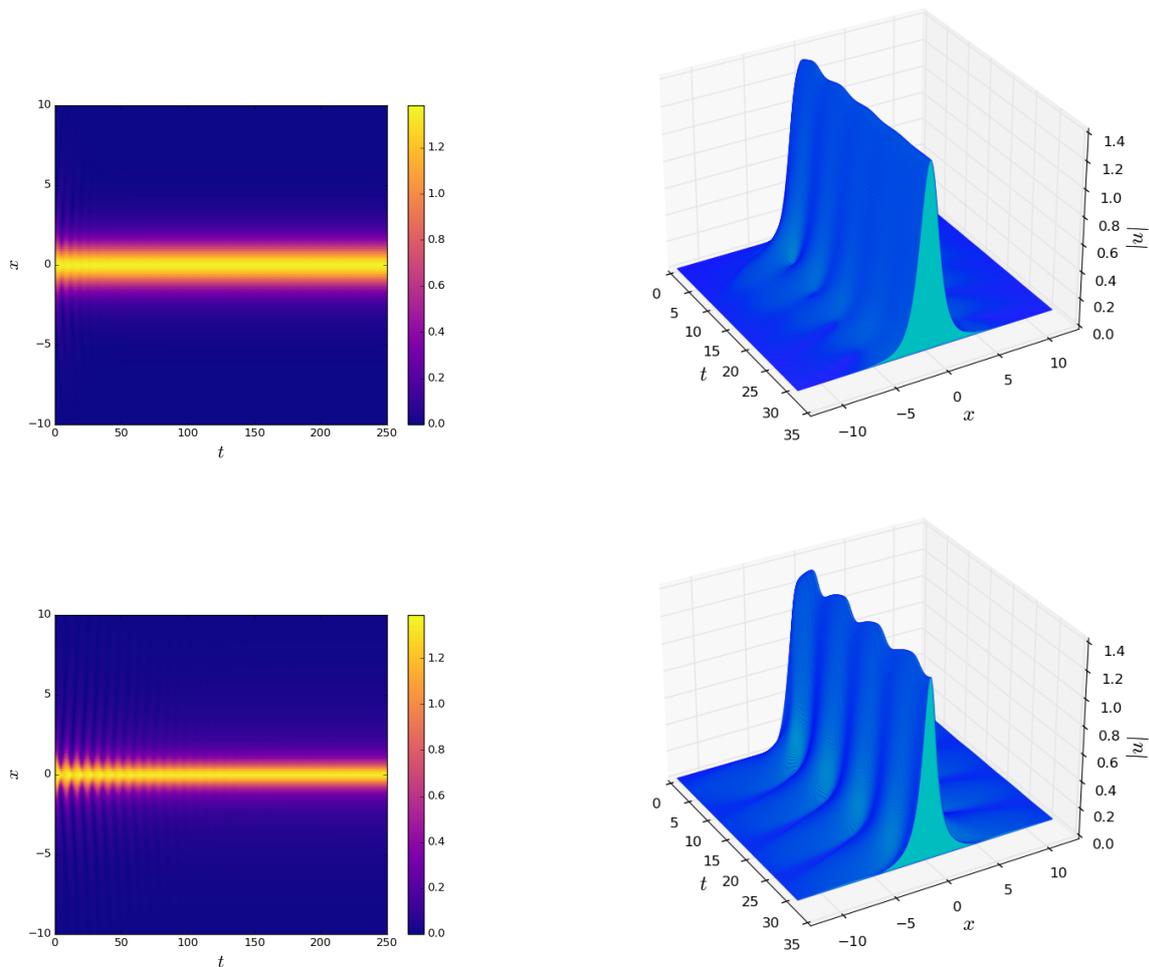


Figura 5.15: (Izquierda) Mapa de color del módulo de la solución hasta $t = 250$, a partir de un estado inicial gaussiano que converge a un solitón disipativo. (Derecha) Evolución del módulo de la solución hasta $t = 30$, mostrando los detalles de la dinámica inicial. (Arriba) Resultados para $\alpha = 1,8$. (Abajo). Resultados para $\alpha = 1,1$. Los restantes parámetros del modelo son $\beta = 0,1, \gamma = -1,0, \delta = -0,2, \varepsilon = 1,7, \nu = -0,115, \mu = -1,0$. Las soluciones resultan del método aditivo simétrico de orden 6 con $\Delta t = 0,025$ y el método pseudoespectral de Hermite con $N = 300$.

Capítulo 6

Adaptatividad temporal de métodos de descomposición

Como ha sido ejemplificado en el Capítulo anterior, el costo computacional de un método numérico de integración depende del tipo de método, de su orden y de la exactitud (o error) que se desea alcanzar. Esta exactitud es a su vez una función del tamaño del paso de integración Δt utilizado. En términos generales, si en la integración numérica de un problema de valores iniciales el tamaño de paso se mantiene fijo, habrá intervalos en los que la exactitud de la solución numérica será excesiva (demandando un costo demasiado elevado) y otros en los que será insuficiente. El sentido preciso de estas adjetivaciones dependerá del error que se considere tolerable en un problema dado. Definida esta *tolerancia* –máximo error admisible expresado mediante una norma adecuada– es posible elaborar estrategias de *adaptatividad temporal* para adecuar dinámicamente el tamaño de paso de forma que el error se mantenga dentro de los límites deseados y simultáneamente se disminuya el costo computacional, siendo este un tema clásico en el ámbito de la computación científica cuya investigación sigue vigente (Hairer et al., 1993; Press et al., 2007; Hairer & Wanner, 2010).

La posibilidad de implementar un integrador adaptativo eficaz depende de dos factores: por un lado, la eficiencia con la que pueda estimarse el error local del método de integración para un tamaño de paso dado; por otra parte, la existencia de una estrategia de control económica y robusta para seleccionar un tamaño de paso adecuado a partir de dicha estimación e información complementaria.

Tradicionalmente, dos técnicas han dominado la estimación del error local. Una de ellas requiere utilizar un solo método de orden conocido y aproximar la solución usando dos tamaños de paso distintos (por ejemplo, Δt y $\Delta t/2$) para estimar el error mediante *extrapolación de Richardson*. Alternativamente, dos métodos de orden distinto con el mismo tamaño de paso permiten estimar el error del método de menor orden como la diferencia entre las aproximaciones arrojadas por cada uno. En ambos casos, la penalidad derivada de los cálculos adicionales debe justificarse por el ahorro en costo computacional total. La primera técnica es explotada eficientemente en los integradores de Bulirsh–Stoer (Press et al., 2007) mientras que los casos más exitosos de la segunda son los populares integradores de Runge-Kutta (RK) adaptativos

debidos a Fehlberg, Cash y Karp y Dormand y Prince, analizados exhaustivamente en [Hairer et al. \(1993\)](#); [Ascher & Petzold \(1998\)](#); [Hairer & Wanner \(2010\)](#); [Butcher \(2016\)](#). Estos últimos se construyen a partir de dos métodos *embebidos* o *apareados* de tal forma de minimizar el número de evaluaciones del campo vectorial que se está integrando (que suele ser la operación más costosa computacionalmente). Cabe destacar que la posibilidad de identificar pares adecuados para construir esquemas de este tipo depende de la resolución de un conjunto de *condiciones de orden* polinomiales cuya complejidad aumenta con el orden de los métodos, volviéndose rápidamente una tarea no trivial. No obstante, debido a su eficiencia se han vuelto los integradores monopaso *por defecto* en lenguajes y entornos de computación científica como Python, Julia, R, Matlab y GNU Octave, contando con implementaciones robustas y flexibles en forma de *caja negra* a partir de librerías escritas en C/C++ y Fortran.

La generalidad de estas ideas permite adecuarlas a la construcción de métodos adaptativos basados en descomposición de operadores. En el caso de métodos de descomposición multiplicativos, esto ha sido explorado recientemente en los trabajos de [Thalhammer & Abhau \(2012\)](#), [Koch et al. \(2013\)](#) y [Auzinger et al. \(2017, 2019\)](#) utilizando pares embebidos. Los esquemas deducidos en esos trabajos se encuentran resumidos en [Auzinger & Koch \(2023\)](#). La construcción de estos métodos presenta dificultades similares a los esquemas RK adaptativos por requerir la solución de sistemas de ecuaciones polinomiales, de tal suerte que la identificación de los pares se vuelve especialmente engorrosa, como queda reflejado en la sofisticación de las técnicas utilizadas por estos autores, que recurren a algoritmos tanto numéricos como simbólicos. Por otra parte, es conocido que la modificación en el tamaño de paso destruye la simplecticidad de los métodos, perdiéndose de esta forma una de las características fundamentales de los esquemas multiplicativos ([Calvo & Sanz-Serna, 1993](#)).

Los métodos afines de descomposición investigados en el presente trabajo y presentados originalmente en [De Leo et al. \(2016\)](#) resultan naturalmente aptos para la estimación del error local ya que, por su propia construcción basada en sucesivas extrapolaciones e independientemente del orden, embeben los métodos de orden inferior, como fuera indicado oportunamente en [Stillfjord \(2018\)](#). La construcción de esquemas adaptativos resulta en este caso mucho más directa y sistemática que para los tradicionales métodos multiplicativos, siendo una vía previamente no explorada y cuya investigación es uno de los aportes de esta tesis. En este capítulo, emprendemos la tarea de implementar y evaluar técnicas de adaptatividad temporal para los métodos afines de descomposición, estudiando su eficiencia en varios problemas de interés y comparándolos con los métodos multiplicativos adaptativos ya mencionados.

6.1. Estimación del error local

El procedimiento esencial para el control del paso de integración en los esquemas adaptativos es la *estimación del error local* del método, esto es, la obtención de una medida de la diferencia entre la solución exacta del problema y la solución proporcionada por el método para un paso de integración de tamaño Δt a partir del mismo dato inicial u_0 . Una técnica para estimar este error de manera asintóticamente correcta para $\Delta t \rightarrow 0$ consiste en calcular la diferencia

entre las soluciones de dos métodos de distinto orden. En efecto, supongamos que $u(t)$ es la solución exacta del problema de valores iniciales con condición inicial $u_0 = u(0)$. Dados los propagadores (integradores) numéricos Φ_q y $\Phi_{\hat{q}}$ de orden q y \hat{q} respectivamente, con $q > \hat{q}$, tenemos

$$\begin{aligned} u(\Delta t) &= \Phi_q(\Delta t, u_0) + C(u_0)\Delta t^{q+1} + \mathcal{O}(\Delta t^{q+2}) = \Phi_q(\Delta t, u_0) + E(\Delta t, u_0) \\ &= \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, u_0) + \hat{C}(u_0)\Delta t^{\hat{q}+1} + \mathcal{O}(\Delta t^{\hat{q}+2}) = \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, u_0) + \hat{E}(\Delta t, u_0), \end{aligned}$$

siendo $E(\Delta t, u_0)$ y $\hat{E}(\Delta t, u_0)$ las funciones de error de cada método. El error local \hat{e} del método de orden \hat{q} puede estimarse (en una norma oportuna) mediante

$$\begin{aligned} \hat{e} &= \|\hat{E}(\Delta t, u_0)\| = \|\Phi_q(\Delta t, u_0) - \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, u_0) + E(\Delta t, u_0)\| \\ &\leq \|\Phi_q(\Delta t, u_0) - \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, u_0)\| + \|E(\Delta t, u_0)\| \\ &\approx \|\Phi_q(\Delta t, u_0) - \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, u_0)\|, \end{aligned} \quad (6.1)$$

donde hemos supuesto que el error del método de mayor orden q es despreciable si Δt es suficientemente pequeño, ya que $\|E(\Delta t, u_0)\| \rightarrow 0$ más rápido que $\|\hat{E}(\Delta t, u_0)\|$ cuando $\Delta t \rightarrow 0$ (Hairer et al., 1993). Como medida del error local puede utilizarse la raíz del error cuadrático medio (RMSE)

$$\hat{e} = \left\| \frac{\hat{\mathbf{e}}}{\sqrt{N}} \right\|_2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \hat{e}_n^2}, \quad (6.2)$$

siendo

$$\hat{\mathbf{e}} = (\hat{e}_n) = \Phi_q(\Delta t, \mathbf{u}_0) - \Phi_{\hat{q}}(\Delta t, \mathbf{u}_0), \quad (6.3)$$

y \mathbf{u}_0 el vector cuyos elementos son $u_0(x_n), n = 1, \dots, N$, donde x_n es el n -ésimo punto de la grilla de la discretización espacial¹. Un requerimiento razonable para la estimación es que sea *económica* en términos computacionales. La estrategia habitual para satisfacer esta exigencia y minimizar el costo computacional de la estimación consiste en utilizar dos métodos de órdenes diferentes q y \hat{q} (en general, aunque no necesariamente, $q = \hat{q} + 1$) tales que los mismos compartan la mayor cantidad posible de evaluaciones del campo vectorial que se está integrando.

6.1.1. Métodos multiplicativos adaptativos

Aplicar las ideas previas a los métodos de descomposición multiplicativos es equivalente a seleccionar pares de esquemas de distinto orden cuyas primeras etapas utilicen idénticos coeficientes a_i, b_i . Para ejemplificar, consideremos el par de esquemas embebidos propuesto en Auzinger et al. (2017) bajo la denominación Emb $4/3$ AK p. Se trata de dos esquemas de $s = \hat{s} = 5$ etapas, de órdenes $q = 4$ y $\hat{q} = 3$ respectivamente, cuyos coeficientes se muestran en el Cuadro 6.1. Puede observarse que las primeras dos etapas de ambos esquemas tienen idénticos coeficientes. Los coeficientes de otros pares de esquemas multiplicativos construidos

¹Alternativamente, podría considerarse el error en la norma del máximo $\hat{e} = \|\hat{\mathbf{e}}\|_\infty = \max_n |\hat{e}_n|$ o cualquier otra norma adecuada al problema.

i	a_i	b_i	i	\hat{a}_i	\hat{b}_i
1	0.125962888700250514	a_5	1	0.125962888700250514	a_5
2	0.751193431379145450	a_4	2	0.751193431379145450	a_4
3	0.127551831557005609	a_3	3	0.000000000000000000	0.261153550449697153
4	-0.338296598434303506	a_2	4	-0.242703571757396124	0.596114052266110425
5	0.333588446797901933	a_1	5	0.365547251678000160	0.147440548920593995

Cuadro 6.1: Coeficientes del par de esquemas multiplicativos embebidos Emb $4/3$ AK p. (Izquierda) Esquema *palindrómico* de orden $q = 4$ con $s = 5$ etapas. (Derecha) Esquema de orden $\hat{q} = 3$ con $\hat{s} = 5$ etapas. Los esquemas comparten las dos primeras etapas.

de manera similar pueden consultarse en el catálogo elaborado por [Auzinger & Koch \(2023\)](#). Estos autores obtuvieron los coeficientes de cada par de esquemas embebidos resolviendo un problema de optimización para minimizar el número de etapas totales, maximizar el número de etapas compartidas y reducir los coeficientes del término principal de la función de error, dentro del conjunto de soluciones posibles del sistema de ecuaciones polinomiales (condiciones de orden). Se trata de una tarea no trivial pero inevitable debido a la naturaleza de los esquemas multiplicativos, como ya se ha mencionado. Los métodos multiplicativos que consideraremos en los ejemplos numéricos de este Capítulo son los señalados como *más eficientes* en el trabajo de [Auzinger et al. \(2019\)](#), denominados Emb $4/3$ AK p, Emb $5/4$ AK (ii), PP $5/6$ A y PP $5/6$ HA (los números señalados en cada esquema indican los órdenes de convergencia del par de métodos).

6.1.2. Métodos afines adaptativos

Los métodos de descomposición afines naturalmente *embeben* métodos de orden inferior como consecuencia de su propia construcción basada en extrapolación de Richardson. Para ejemplificarlo, notemos que el esquema simétrico de orden 4

$$\begin{aligned} \Phi_{AS4}(h) = & -\frac{1}{6} (\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)) \\ & + \frac{2}{3} (\Phi_1^+(h/2)\Phi_1^+(h/2) + \Phi_1^-(h/2)\Phi_1^-(h/2)) \end{aligned} \quad (6.4)$$

requiere calcular la combinación simétrica $\Phi_1^+(h) + \Phi_1^-(h)$ en su primera etapa, que difiere del método de orden 2 solo por el factor que la acompaña ($-1/6$ en lugar de $1/2$). Por lo tanto, el método de orden 2 puede calcularse de manera muy económica mediante una simple multiplicación por un escalar con costo $\mathcal{O}(N)$. El error del mismo puede entonces estimarse a partir de 6.1 como

$$\hat{e}_2 = \|\Phi_{AS4}(\Delta t, u_0) - \Phi_{AS2}(\Delta t, u_0)\|.$$

La estrategia de este ejemplo puede generalizarse de manera trivial a métodos afines de distinto orden.

6.2. Control de tamaño de paso

Contándose con una estimación del error local \hat{e} , puede procederse a la determinación del tamaño de paso Δt que mantenga controlado dicho error por debajo de una *tolerancia* τ preestablecida². Concretamente, supongamos que se efectúa un paso de integración de tamaño Δt_i y se estima un error \hat{e}_i mediante las ecuaciones (6.1)–(6.3). Sea τ el error local máximo tolerable y Δt_0 un tamaño de paso tal que $\hat{e}_0 \lesssim \tau$. Dado que $\hat{e} \sim \|\hat{C}(u_0)\| \Delta t^{\hat{q}+1}$ tenemos

$$\hat{e}_0 \approx \frac{\Delta t_0^{\hat{q}+1}}{\Delta t_i^{\hat{q}+1}} \hat{e}_i \lesssim \tau, \quad (6.5)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} \Delta t_0 &\lesssim \left(\frac{\tau}{\hat{e}_i}\right)^{1/\hat{q}+1} \Delta t_i \\ &= k_i \Delta t_i = \Delta t_{i+1} \end{aligned} \quad (6.6)$$

siendo $k_i = (\tau/\hat{e}_i)^{1/\hat{q}+1}$ una cantidad que estima el *factor de cambio* de Δt_i y que debe garantizar el cumplimiento de la restricción (6.5). Esta fórmula sugiere el siguiente algoritmo elemental para el control del tamaño de paso:

1. definir un tamaño de paso inicial Δt_i (manual o automáticamente³);
2. realizar un paso de integración Δt_i mediante el integrador de mayor orden Φ_q y estimar el error local correspondiente \hat{e}_i de la solución numérica mediante las ecuaciones (6.1)–(6.3);
3. calcular a través de la ecuación (6.6) el tamaño de paso siguiente Δt_{i+1} (equivalentemente, el factor de cambio k_i);
4. si $\Delta t_{i+1} < \Delta t_i$ (equivalentemente, si $k_i < 1$) *rechazar* el paso, descartar la solución numérica apenas obtenida y repetir las acciones 2 y 3 asignando $\Delta t_i \leftarrow \Delta t_{i+1}$; de otro modo *aceptar* el paso (conservando la correspondiente solución numérica) e inicializar el paso *siguiente* con el valor $\Delta t_{i+1} \leftarrow k_i \Delta t_i$;
5. repetir desde 2 hasta finalizar la integración.

A partir de este esquema básico pueden construirse controladores más sofisticados. Una mejora habitual consiste en introducir un *factor de seguridad* $0 < \kappa < 1$ con el objetivo de disminuir la probabilidad de la costosa operación de *rechazo* en el siguiente paso, teniendo en cuenta además que el error local podría estar siendo *subestimado* en (6.1), tanto más cuanto mayor es el tamaño de paso debido al carácter asintótico de la estimación. Por otra parte, es deseable evitar cambios demasiado bruscos en el tamaño de paso, por lo que también se prescriben dos cotas κ_{\min} , κ_{\max}

²En los ejemplos solo consideramos tolerancias absolutas τ , pudiendo incorporarse tolerancias relativas sin mayores dificultades. Para mayores detalles, ver Capítulo II.4 de [Hairer et al. \(1993\)](#).

³Para métodos automáticos robustos de inicialización, ver [Gladwell et al. \(1987\)](#).

tales que $0 < \kappa_{\min} \leq k_i \leq \kappa_{\max}$. Consecuentemente, el mapa definido por (6.6) se redefine incorporando estos criterios como⁴

$$k_i = \text{mín} \left(\kappa_{\max}, \text{máx} \left(\kappa_{\min}, \kappa \left(\frac{\tau}{\hat{e}_i} \right)^{1/\hat{q}+1} \right) \right). \quad (6.7)$$

Este será el controlador de tamaño de paso que usaremos en los ejemplos numéricos del capítulo, siendo eficiente y robusto para los fines de nuestro trabajo. En caso de que el problema lo requiera por razones de estabilidad, pueden adoptarse estrategias más elaboradas inspiradas en técnicas de control automático y filtros digitales como las propuestas en [Gustafsson et al. \(1988\)](#); [Gustafsson \(1991\)](#); [Söderlind \(2002, 2003, 2006\)](#); [Söderlind & Wang \(2006\)](#). Tratándose de un campo de investigación en sí mismo no abundaremos en mayores detalles teóricos, remitiendo al lector a la bibliografía citada. Sin embargo, es oportuno mencionar que además del algoritmo ya discutido pueden implementarse de forma análoga los siguientes controles para la adaptatividad de los métodos de descomposición:⁵

- Control PI, incluyendo memoria del error previo

$$k_i = \text{mín} \left(\kappa_{\max}, \text{máx} \left(\kappa_{\min}, \kappa \left(\frac{\tau}{\hat{e}_i} \right)^{\beta_I/\hat{q}+1} \left(\frac{\hat{e}_{i-1}}{\hat{e}_i} \right)^{\beta_P/\hat{q}+1} \right) \right) \quad (6.8)$$

- Control PI con memoria del error y tamaño de paso previo

$$k_i = \text{mín} \left(\kappa_{\max}, \text{máx} \left(\kappa_{\min}, \kappa \left(\frac{\tau}{\hat{e}_i} \right)^{\beta_I/\hat{q}+1} \left(\frac{\hat{e}_{i-1}}{\hat{e}_i} \right)^{\beta_P/\hat{q}+1} \left(\frac{\Delta t_i}{\Delta t_{i-1}} \right)^{-\alpha_1} \right) \right) \quad (6.9)$$

6.3. Ejemplo numérico: aplicación a la NLSE3

Con el fin de evaluar el desempeño de los métodos de descomposición adaptativos en el contexto de problemas hamiltonianos reversibles resolvimos el problema de valores iniciales dado por la NLSE3 considerando como solución exacta de referencia $u_{\text{ref}}(x, t)$ un 2-soliton cuya expresión analítica es ([Al Khawaja & Al Sakkaf, 2019](#))

$$u_{\text{ref}}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{-\gamma}} [\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)], \quad (6.10)$$

siendo

$$\Psi_1(x, t) = \frac{M_{12} (\gamma_1^{-1} + \gamma_2^*) - M_{22} (\gamma_2^{-1} + \gamma_2^*)}{\Delta},$$

$$\Psi_2(x, t) = \frac{M_{21} (\gamma_1^* + \gamma_2^{-1}) - M_{11} (\gamma_1^{-1} + \gamma_1^*)}{\Delta},$$

⁴En particular, en el controlador utilizado en los experimentos numéricos definimos $\kappa = 0,9$, $\kappa_{\min} = 0,5$ y $\kappa_{\max} = 2,0$.

⁵Las constantes β_I y β_P han de seleccionarse de acuerdo a las características del problema que se está resolviendo y algunos ejemplos pueden encontrarse en la bibliografía citada.

donde

$$\begin{aligned}
 M_{jk} &= 1 / (\lambda_j + \lambda_k^*), \\
 \lambda_j &= \eta_j + i v_j, \\
 \gamma_j(x, t) &= \exp \left(\lambda_j (x - x_{0j}) + i \left[\lambda_j^2 (t - t_0) / 2 + \phi_{0j} \right] \right), \\
 \Delta &= M_{12} M_{21} \left(\gamma_1^* + \gamma_2^{-1} \right) \left(\gamma_1^{-1} + \gamma_2^* \right) - M_{11} M_{22} \left(\gamma_1^{-1} + \gamma_1^* \right) \left(\gamma_2^{-1} + \gamma_2^* \right),
 \end{aligned}$$

con $\eta_j, v_j, t_0, x_{0j}, \phi_{0j}$ constantes arbitrarias para $j = 1, 2$. Esta solución es de implementación relativamente simple pero suficientemente versátil como para habilitar el estudio de un amplio espectro de dinámicas mediante una adecuada elección de los parámetros, permitiendo poner a prueba los esquemas adaptativos en situaciones cualitativamente diversas.

Para ejemplificar el comportamiento de los esquemas adaptativos, estudiamos en primer lugar dos solitones asintóticamente no interactuantes que colisionan elásticamente dentro del dominio espacio-temporal considerado, correspondientes a los parámetros $\eta_1 = \eta_2 = 1, x_{02} = -x_{01} = 5, v_2 = -v_1 = 5, t_0 = \phi_{01} = \phi_{02} = 0$ de la ecuación 6.10. La dinámica es relativamente previsible salvo durante la colisión, donde varía localmente de forma continua pero abrupta, poniendo a prueba el algoritmo de control de paso. En la Figura 6.1 se muestra el módulo de dicha solución en el intervalo $t \in [0, 10]$, calculada con un método de descomposición afín adaptativo de orden 8 (`affineS8`) utilizando el algoritmo elemental de control de paso 6.7. La densidad de líneas es inversamente proporcional al tamaño de paso utilizado. Se observa en la figura que la zona de la colisión requiere una mayor resolución temporal –esto es, un tamaño de paso menor– para mantener el error local por debajo de la tolerancia prescrita, que en este caso es $\tau = 10^{-10}$. Puede apreciarse de qué modo los solitones elementales evolucionan independientemente tras la colisión, sin huellas aparentes de la misma más que un desplazamiento lateral correspondiente a un cambio de fase relativo.

En el panel superior de la Figura 6.2 se muestra un mapa de color del módulo de la solución en el plano $x - t$. Correspondientemente, el panel central destaca los tamaños de paso Δt determinados por el algoritmo de control en función del tiempo t y utilizados para calcular la solución numérica. El panel inferior, exhibe el error global $\mathcal{E}_\infty(t)$ de la solución numérica respecto de la solución exacta de referencia en función del tiempo t , que resulta sumamente bajo, del orden de 10^{-11} .

Como ejemplos adicionales con distintas características, mostramos en las Figuras 6.3, 6.4, 6.5 y 6.6 dinámicas alternativas resultantes de otros conjuntos de parámetros. En términos generales, se observa que allí donde se hace necesario modificar rápidamente el tamaño de paso para satisfacer la tolerancia τ impuesta al error local es donde el error global calculado respecto de la solución de referencia crece más rápidamente. Por otra parte, resulta evidente el excelente desempeño del esquema simétrico adaptativo de orden 8 en cuanto a la exactitud alcanzada, con errores cercanos a 10^{-11} .

Considerando nuevamente una colisión de solitones levemente asimétrica dada por la solución de referencia 6.10 con parámetros $\eta_1 = 1, \eta_2 = 1,5, x_{01} = -4, x_{02} = 5, v_1 = 0,5, v_2 =$

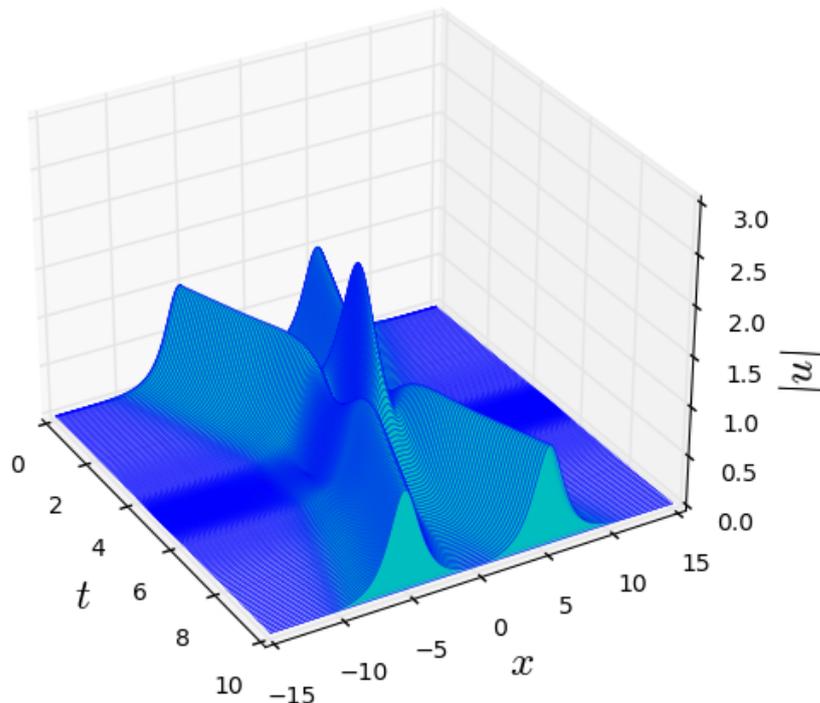


Figura 6.1: Evolución de un 2-soliton de la NLSE3 correspondiente a los parámetros $\eta_1 = \eta_2 = 1$, $x_{02} = -x_{01} = 5$, $v_2 = -v_1 = 5$, $t_0 = \phi_{01} = \phi_{02} = 0$ de la ecuación 6.10. La densidad de curvas en función del tiempo es inversamente proporcional al tamaño del paso de integración. Puede observarse la mayor densidad de curvas en la zona de la colisión, que muestra la necesidad de mayor resolución temporal para mantener el error por debajo de la tolerancia.

-1 , $\phi_{01} = \phi_{02} = 0$, calculamos el error global \mathcal{E}_∞ a $t = 10$ de la solución numérica obtenida con los esquemas adaptativos investigados, para diversos valores de la tolerancia absoluta $\tau \in [10^{-11}, 10^{-1}]$. En la Figura 6.7 se muestra dicho error como función de la tolerancia τ (panel izquierdo) y del costo computacional (panel derecho). Puede observarse que los esquemas afines adaptativos son a la vez *más eficientes* y *exactos* que los esquemas multiplicativos de orden correspondiente. Solo para tolerancias de orden 10^{-3} o superiores, el método Emb 4/3 AK p es más eficiente que los esquemas afines adaptativos de orden 6 y 8, y el método PP 5/6 HA es muy levemente más eficiente que el esquema afín de orden 8. Sin embargo, resulta altamente improbable que métodos de alto orden como los investigados, destinados a alcanzar elevada exactitud, se utilicen con tolerancias tan groseras. El método afín de orden 6 es el de mejor desempeño general para $\tau \lesssim 10^{-4}$ y el de orden 4 lo es para $\tau \gtrsim 10^{-4}$. El método afín de orden 8 es menos eficiente que el de orden 6 pero supera a todos los restantes para $\tau \lesssim 10^{-5}$. Entre los métodos no afines, PP 5/6 HA es el más eficiente para $\tau \lesssim 10^{-6}$ y Emb 4/3 AK p para $\tau \gtrsim 10^{-6}$.

A los efectos de comprender los motivos del mejor desempeño de los métodos afines respecto de los esquemas multiplicativos, comparamos el método affineS6 con el método PP 5/6 HA, siendo los representantes más eficientes de cada tipo para niveles elevados de exac-

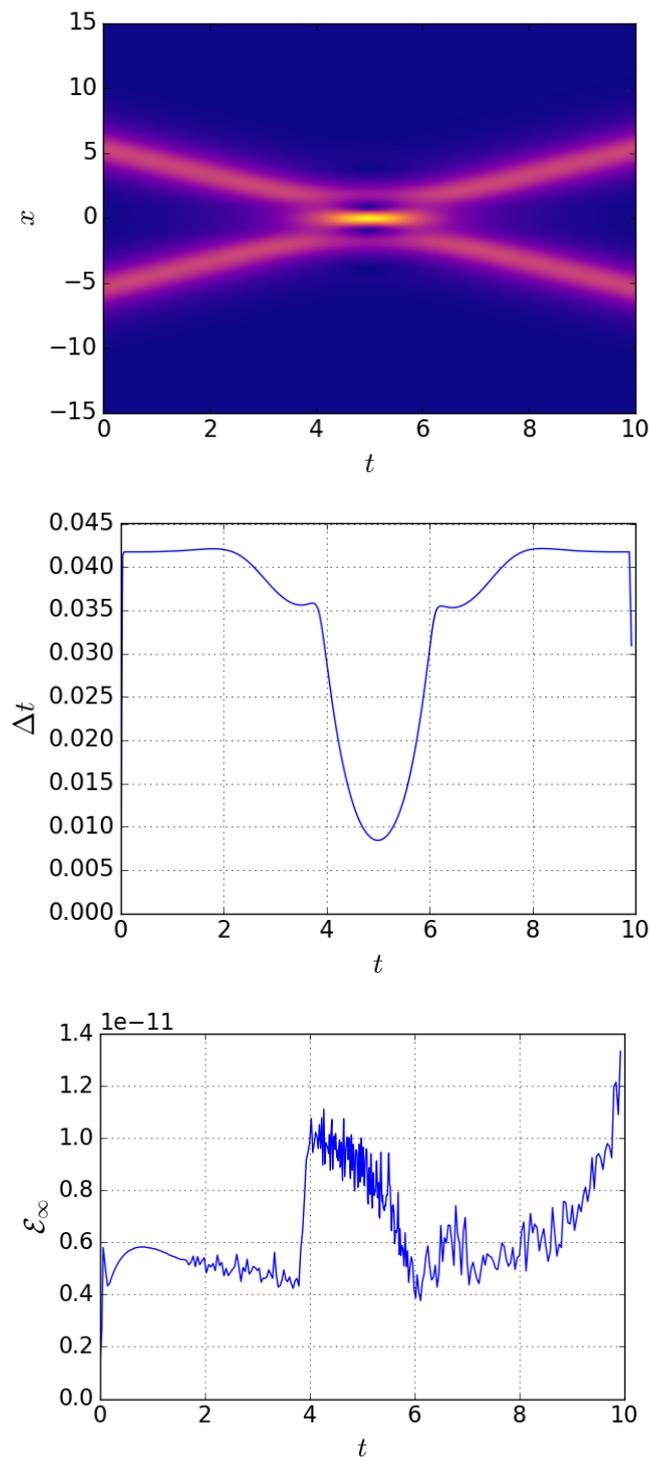


Figura 6.2: (Arriba) Módulo de la solución numérica en función del tiempo. (Centro) Tamaño de paso Δt vs. t , calculado por el algoritmo de control (6.7) con una tolerancia $\tau = 10^{-10}$. (Abajo) Máximo error puntual absoluto calculado respecto de la solución exacta de referencia (la unidad de la escala vertical es 10^{-11}). La solución numérica está calculada con un método aditivo de orden 8 y una discretización pseudo-espectral de Fourier con $N = 2^{11}$ modos. Los parámetros son los de la Figura 6.1.

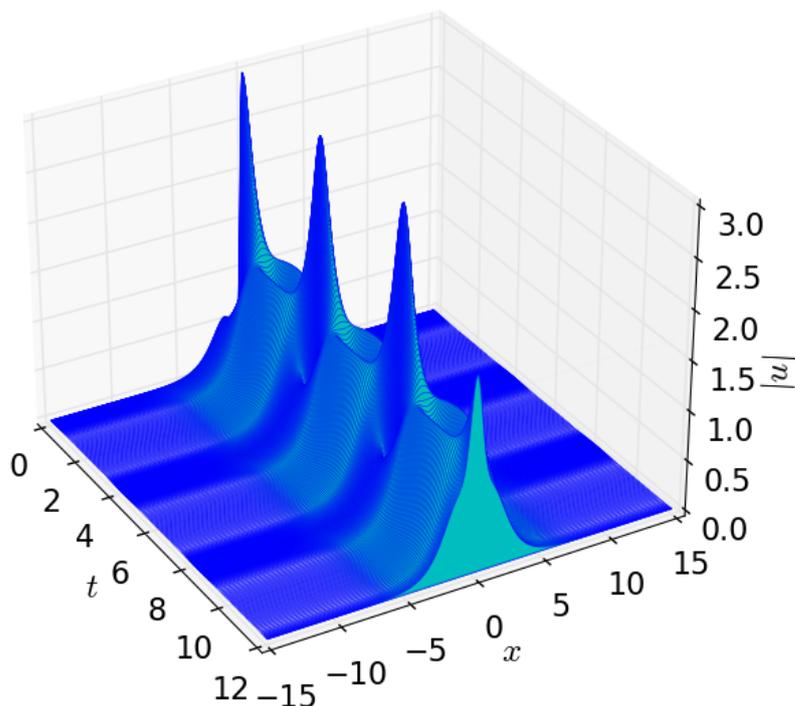


Figura 6.3: Evolución del módulo de un 2-soliton *pulsante* (breather) de la NLSE3, correspondiente a los parámetros $\eta_1 = 2, \eta_2 = 1, x_{02} = x_{01} = v_2 = v_1 = t_0 = \phi_{01} = \phi_{02} = 0$ de la solución 6.10.

titud. La Figura 6.7 indica que estos métodos tienen aproximadamente el mismo error global $\mathcal{E}_\infty(t = 10) \approx 10^{-10}$ cuando la tolerancia exigida es $\tau \approx 2,5 \cdot 10^{-9}$ para el esquema afín y $\tau \approx 5,0 \cdot 10^{-11}$ para el esquema multiplicativo. En la Figura 6.8 podemos contrastar los resultados de ambos métodos para las tolerancias indicadas. El panel superior muestra el valor absoluto de la solución, mientras que el panel central exhibe la evolución del tamaño de paso Δt en función de t para cada método. Si bien las curvas son cualitativamente similares, se aprecia que el método afín es cuantitativamente superior, requiriendo tamaños de paso entre un 20 y un 25 % más largos, o equivalentemente que la cantidad de pasos del método multiplicativo es mayor en un factor entre 1.2 y 1.25. Por otra parte, el método multiplicativo requiere 16 evaluaciones de cada propagador por paso, un 33 % más que las 12 evaluaciones del método aditivo. Podemos estimar entonces que el costo computacional \mathcal{C} del método multiplicativo debiera estar entre un 60 y un 66 % por encima del método aditivo. Efectivamente, esto es muy aproximadamente lo que resulta del cociente entre los valores del costo computacional \mathcal{C} obtenidos de la simulación para cada método. Por último, para validar la comparación mostramos en el panel inferior de la misma figura la evolución del error global para ambos métodos, que resultan del mismo orden de magnitud $\mathcal{E}_\infty \sim 10^{-10}$ y exhiben una semejanza notable en términos cualitativos. En conclusión, el método *affineS6* se revela notablemente superior.

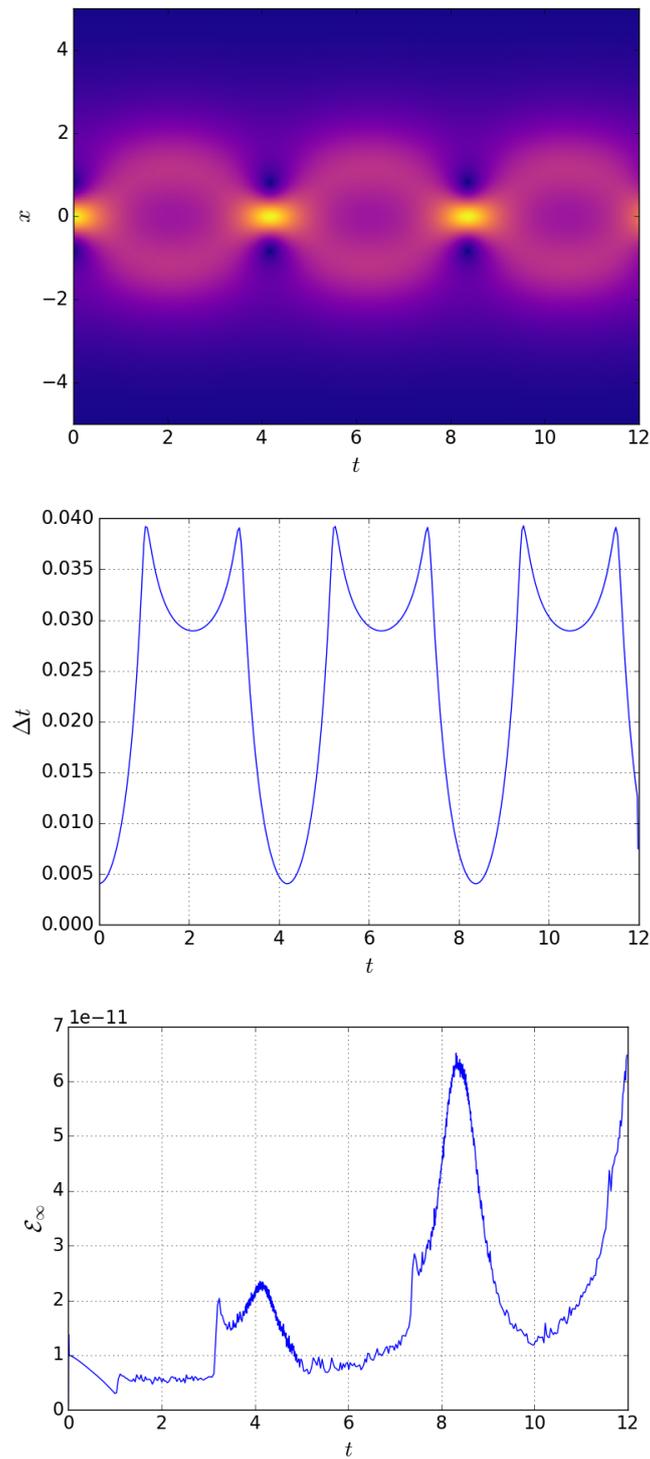


Figura 6.4: (Arriba) Módulo de la solución numérica en función del tiempo para un *breather* de la NLSE3. (Centro) Tamaño de paso Δt vs. t , calculado por el algoritmo de control (6.7) con una tolerancia $\tau = 10^{-10}$. (Abajo) Máximo error puntual absoluto calculado respecto de la solución exacta de referencia (la unidad de la escala vertical es 10^{-11}). La solución numérica está calculada con un método aditivo de orden 8 y una discretización pseudo-espectral de Fourier con $N = 2^{11}$ modos. Los parámetros son los mismos de la Figura 6.3.

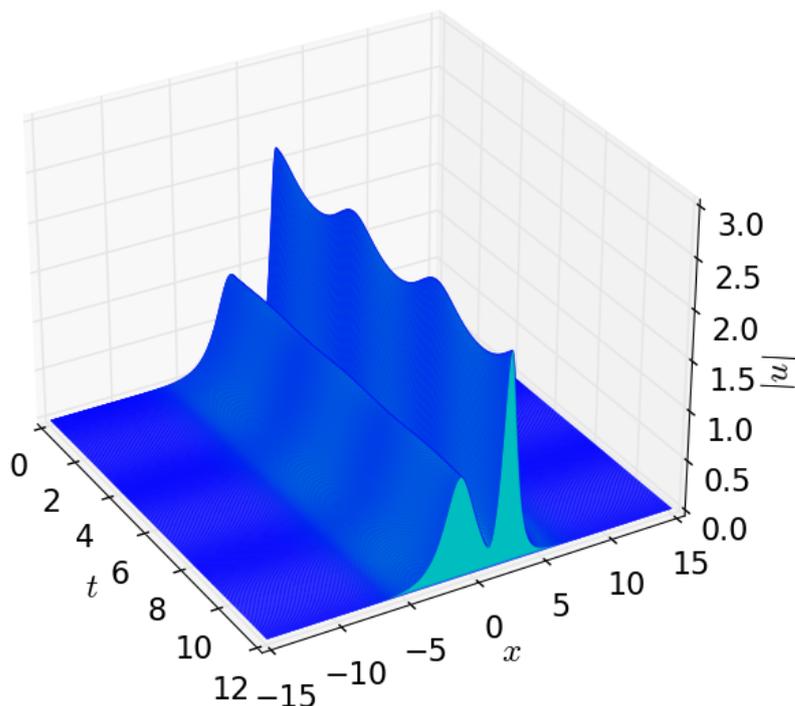


Figura 6.5: Evolución del módulo de un 2-soliton de la NLSE3, correspondiente a los parámetros $\eta_1 = 1, \eta_2 = 2, x_{02} = x_{01} = v_2 = v_1 = t_0 = \phi_{01} = \phi_{02} = 0$ de la solución 6.10.

6.4. Ejemplo numérico: aplicación a la CGLE5

La CGLE5 permite evaluar la eficiencia y estabilidad de los métodos de descomposición adaptativos en un contexto no conservativo, poniéndolos a prueba en una situación más exigente debido a la variedad de sus soluciones. En particular, la existencia de solitones *explosivos*, cuya dinámica alterna en forma periódica entre comportamientos regulares y caóticos, proporciona un excelente caso de estudio. Soluciones de esta clase han sido observadas en experimentos de óptica (Akhmediev et al., 2001; Cundiff et al., 2002; Grelu & Akhmediev, 2012).

En este experimento numérico, consideramos la evolución de un dato inicial gaussiano $u_0(x) = 3 \exp(-x^2/2)$ cuando los parámetros del modelo (2.16) son $D = 1, \beta = 0,125, \gamma = -1, \delta = -0,1, \varepsilon = 1, \nu = -0,6, \mu = -0,1$, dando origen al solitón explosivo mostrado en la Figura 6.9 obtenido numéricamente mediante un método de Dormand–Prince 8(5,3) con tolerancia absoluta $\text{atol} = 10^{-14}$. Esta será la solución de referencia utilizada para evaluar los métodos de descomposición adaptativos.

De manera análoga al caso de la NLSE3, en la Figura 6.10 mostramos una comparativa de los distintos métodos de descomposición adaptativos evaluados. En el panel izquierdo de dicha figura se muestra el error global \mathcal{E}_∞ de la solución numérica a $t = 20$ en función de la tolerancia τ impuesta al error local. Puede observarse que para todos los esquemas adaptativos afines la relación entre la tolerancia τ y el error global al final de la simulación $\mathcal{E}_\infty(t = 20)$ es

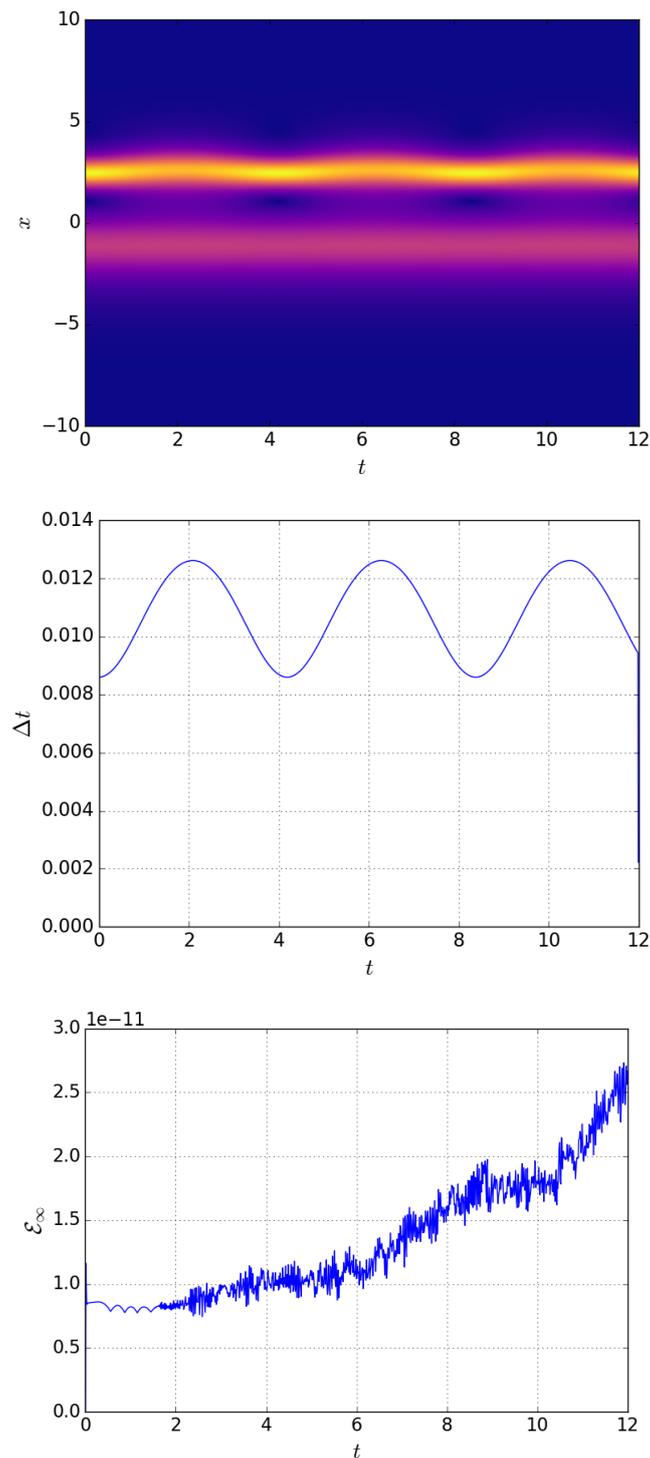


Figura 6.6: (Arriba) Módulo de la solución numérica en función del tiempo. (Centro) Tamaño de paso Δt vs. t , calculado por el algoritmo de control (6.7) con una tolerancia $\tau = 10^{-10}$. (Abajo) Máximo error puntual absoluto calculado respecto de la solución exacta de referencia (la unidad de la escala vertical es 10^{-11}). La solución numérica está calculada con un método aditivo de orden 8 y una discretización pseudo-espectral de Fourier con $N = 2^{11}$ modos. Los parámetros son los mismos de la Figura 6.5.

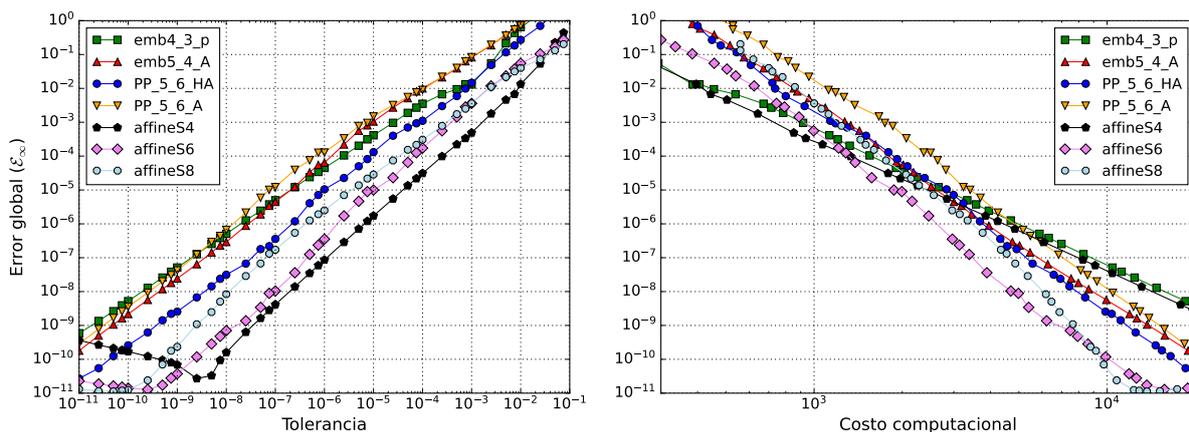


Figura 6.7: Error de la solución numérica $\mathcal{E}_\infty(t = 10)$ en función de la tolerancia absoluta τ (panel izquierdo) y del costo computacional (panel derecho) para distintos esquemas de descomposición adaptativos. La solución de referencia está dada por 6.10 con parámetros $\eta_1 = 1, \eta_2 = 1,5, x_{01} = -4, x_{02} = 5, v_1 = 0,5, v_2 = -1, \phi_{01} = \phi_{02} = 0$.

muy aproximadamente lineal en el rango de τ explorados, indicando que el error global decrece proporcionalmente al error local, y que puede acotarse el primero controlando este último. Por otra parte, los esquemas embebidos multiplicativos, a excepción del de menor orden Emb 4/3 AK p, manifiestan una relación lineal entre el error global \mathcal{E}_∞ y la tolerancia τ exigida solamente si esta última se encuentra por debajo de un umbral de aproximadamente $\tau \approx 10^{-6}$, mostrando una dependencia errática y oscilatoria para tolerancias mayores. Interpretamos este comportamiento de los esquemas multiplicativos embebidos de alto orden como un síntoma de inestabilidad numérica que resulta de los pasos negativos requeridos por estos métodos en el contexto de un problema irreversible. Al mismo tiempo, conjeturamos que el comportamiento más regular por debajo de dicho umbral resulta de la consecuente disminución del tamaño del paso de integración Δt compatible con un requisito de error local más estricto, que les permite sortear la inestabilidad. Sin embargo, el umbral de τ encontrado empíricamente no es generalizable y debiera ser altamente dependiente de las características de la solución, en particular de sus componentes frecuenciales más altas, que son las que se inestabilizan más rápidamente debido al operador difusivo involucrado en la ecuación. Por lo tanto, que este caso particular del problema sea tratable por los métodos multiplicativos para valores $\tau \lesssim 10^{-6}$ no garantiza la estabilidad numérica de los mismos para otras condiciones iniciales o parámetros del modelo. Observando el panel derecho de la Figura 6.10, que muestra la relación entre el error global $\mathcal{E}_\infty(t = 20)$ y el costo computacional \mathcal{C} , estas conclusiones resultan aún más evidentes. Vemos en particular un comportamiento notablemente irregular del esquema multiplicativo PP 5/6 HA, seguido en orden de regularidad por los métodos PP 5/6 A y Emb 5/4 AK. El único método multiplicativo estable en el rango de parámetros estudiados es el de menor orden Emb 4/3 AK p. Aún en su zona de estabilidad, ningún esquema multiplicativo es más eficiente que cualquiera de los métodos afines, salvo Emb 4/3 AK p que tiene un desempeño marginalmente superior al esquema aditivo affineS4 para valores de exactitud bajos y es equivalente en otros

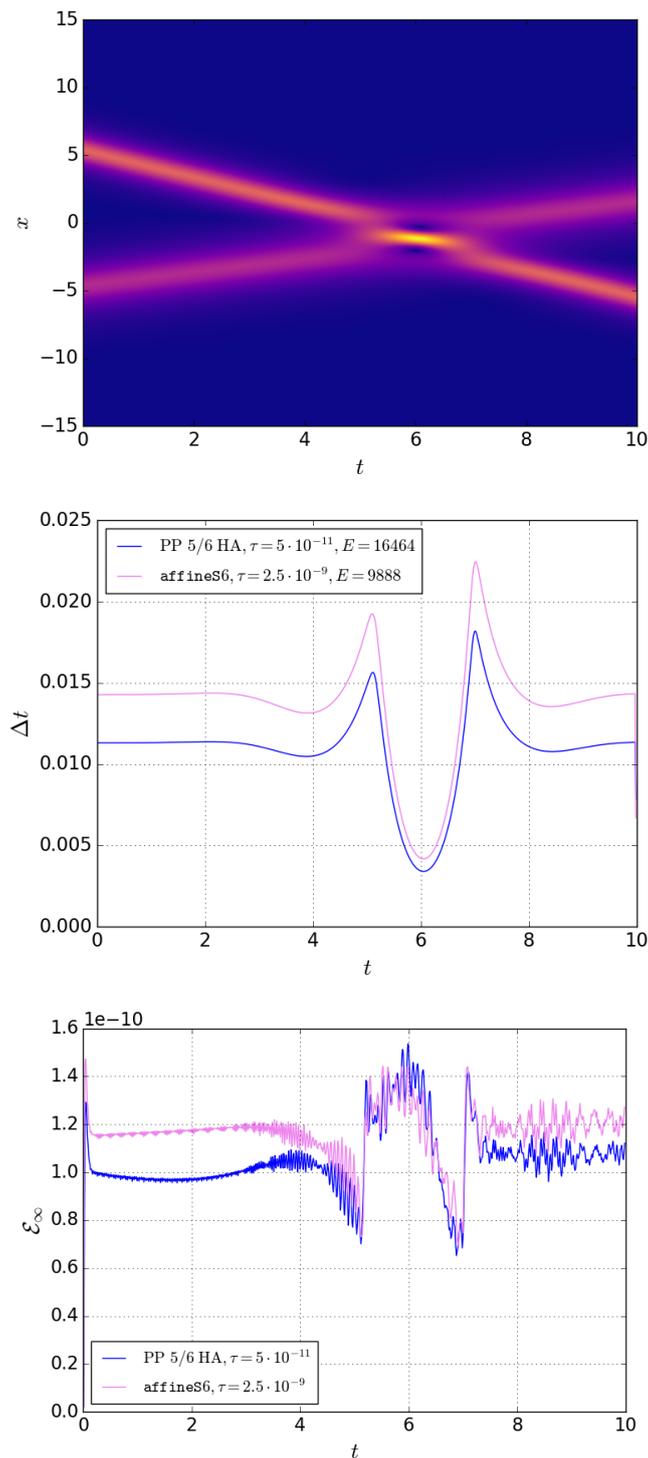


Figura 6.8: (Arriba) Mapa de color del módulo de la solución numérica en función del tiempo. (Centro) Tamaño de paso Δt en función de t , para los métodos PP 5/6 HA y affineS6 con tolerancias absolutas $\tau = 5 \cdot 10^{-11}$ y $\tau = 2,5 \cdot 10^{-9}$, respectivamente. En cada caso se indica el costo computacional \mathcal{C} . (Abajo) Error global \mathcal{E}_∞ en función de t respecto de la solución exacta de referencia para los mismos métodos y tolerancias (la unidad de la escala vertical es 10^{-10}). Los parámetros son los de la Figura 6.7.

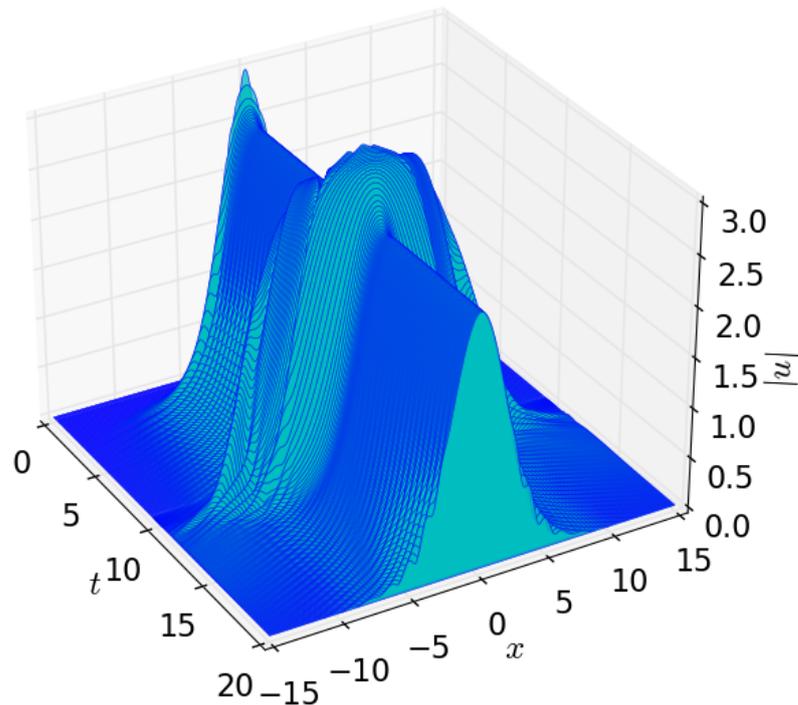


Figura 6.9: Evolución del módulo del solitón disipativo explosivo de la CGLE5 para un dato inicial gaussiano $u_0(x) = 3 \exp(-x^2/2)$ y parámetros $D = 1, \beta = 0,125, \gamma = -1, \delta = -0,1, \varepsilon = 1, \nu = -0,6, \mu = -0,1$.

casos. El mismo gráfico permite concluir que el método aditivo simétrico de orden 8 es más eficiente que el de orden 6, y este que el de orden 4 en todo el rango de parámetros estudiados.

En la Figura 6.11 comparamos el método afín simétrico `affineS6` con los esquemas multiplicativos para un valor de la tolerancia $\tau = 10^{-5}$ que se encuentra en la zona de inestabilidad de estos últimos. El panel superior de la figura muestra un mapa de color del módulo de la solución de referencia en función del tiempo, en el que puede apreciarse la *explosión* del solitón disipativo para $t \approx 10$. En el panel inferior mostramos el tamaño de paso Δt determinado por cada método adaptativo en función del tiempo t . Se observa que con las excepciones del esquema aditivo y del esquema multiplicativo de menor orden `Emb 4/3 AK p`, los métodos multiplicativos exhiben –en mayor o menor medida– un comportamiento poco suave del tamaño de paso, particularmente en las inmediaciones de la región explosiva, y están limitados en la zona «suave» de la solución a tamaños de paso menores. Esto se ve reflejado en el mayor costo computacional \mathcal{C} de los métodos multiplicativos de alto orden (indicado para cada método en la leyenda de correspondiente). En este sentido, se observa que el método `Emb 4/3 AK p` es el de menor costo computacional $\mathcal{C} = 8855$. Sin embargo, el bajo costo computacional de este método se corresponde con un pobre desempeño en términos de error global, que resulta $\mathcal{E}_\infty \approx 5 \cdot 10^{-3}$ contra $\mathcal{E}_\infty \approx 10^{-4}$ del método `affineS6`, como se aprecia en el panel izquierdo de la Figura 6.10 para el valor $\tau = 10^{-5}$.

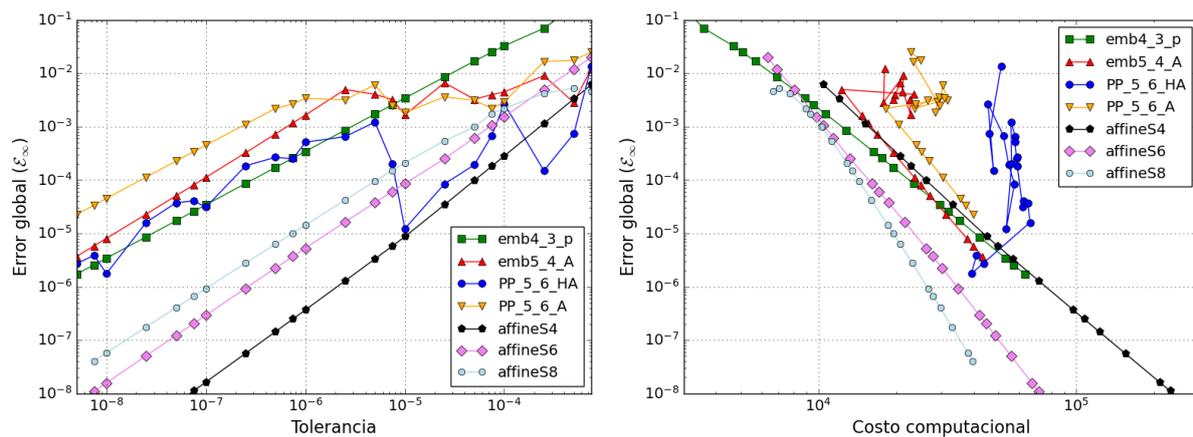


Figura 6.10: (Izquierda) Error global de la solución numérica \mathcal{E}_∞ a $t = 20$ en función de la tolerancia absoluta τ del error local para distintos esquemas de descomposición adaptativos. (Derecha) Error global $\mathcal{E}_\infty(t = 20)$ en función del costo computacional \mathcal{C} para los mismos esquemas. La solución de referencia es el solitón disipativo *explosivo* de la Figura (6.9) calculada numéricamente mediante el método Dormand–Prince 8(5,3) con tolerancia absoluta 10^{-14} .

La Figura 6.12 muestra resultados similares para tolerancias absolutas $\tau = 10^{-6}$ (panel superior) y $\tau = 10^{-7}$ (panel inferior). Se observa que aunque los esquemas multiplicativos de alto orden reducen su comportamiento errático con la disminución de τ y la consecuente reducción del tamaño de paso, siguen manifestando diversos grados de inestabilidad.

En la Figura 6.13 comparamos el desempeño del método afín adaptativo `affineS6` para $\tau = 10^{-6}$ con el del método multiplicativo más estable `Emb 4/3 AK p` para $\tau = 10^{-8}$. Las tolerancias están seleccionadas de tal forma que ambos métodos posean errores globales similares, como puede verificarse en el panel superior de la figura. El panel inferior muestra el tamaño de paso en función del tiempo para dichos métodos. Se aprecia que los tamaños de paso difieren en un factor de aproximadamente 4 y son mayores para el método afín. El costo computacional del método afín ($\mathcal{C} = 26160$) es aproximadamente la mitad que el del método multiplicativo ($\mathcal{C} = 53074$). Resulta evidente que el método afín adaptativo es superior tanto en términos de estabilidad como de eficiencia respecto de todos los esquemas multiplicativos.

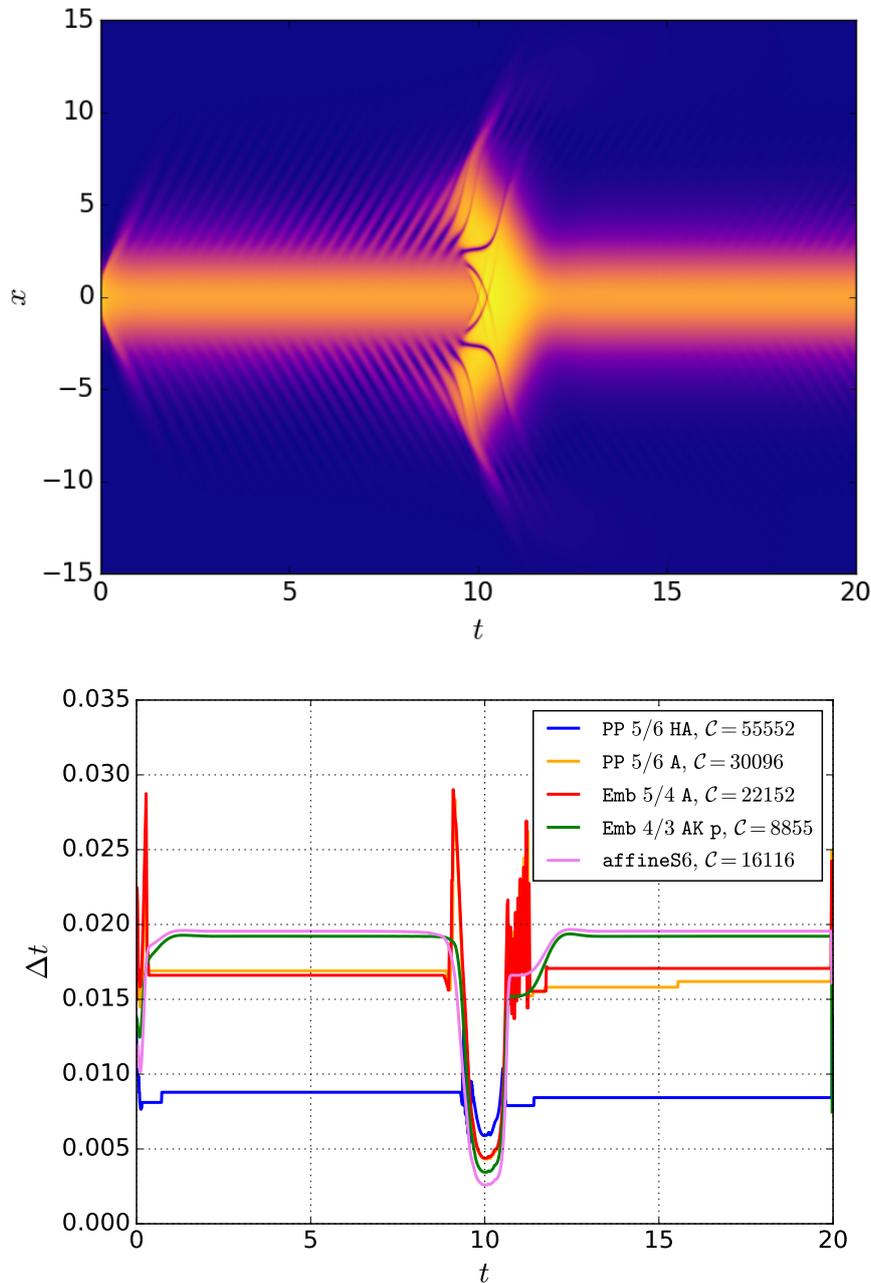


Figura 6.11: (Arriba) Mapa de color para la evolución del módulo del solitón disipativo *explosivo* de la CGLE5 de la Figura 6.9. Se puede apreciar la «explosión» alrededor de $t = 10$ y la subsiguiente regeneración del perfil inicial. (Abajo) Tamaño de paso Δt en función del tiempo t para los esquemas comparados. En todos los casos, la tolerancia absoluta exigida para el error local es $\tau = 10^{-5}$.

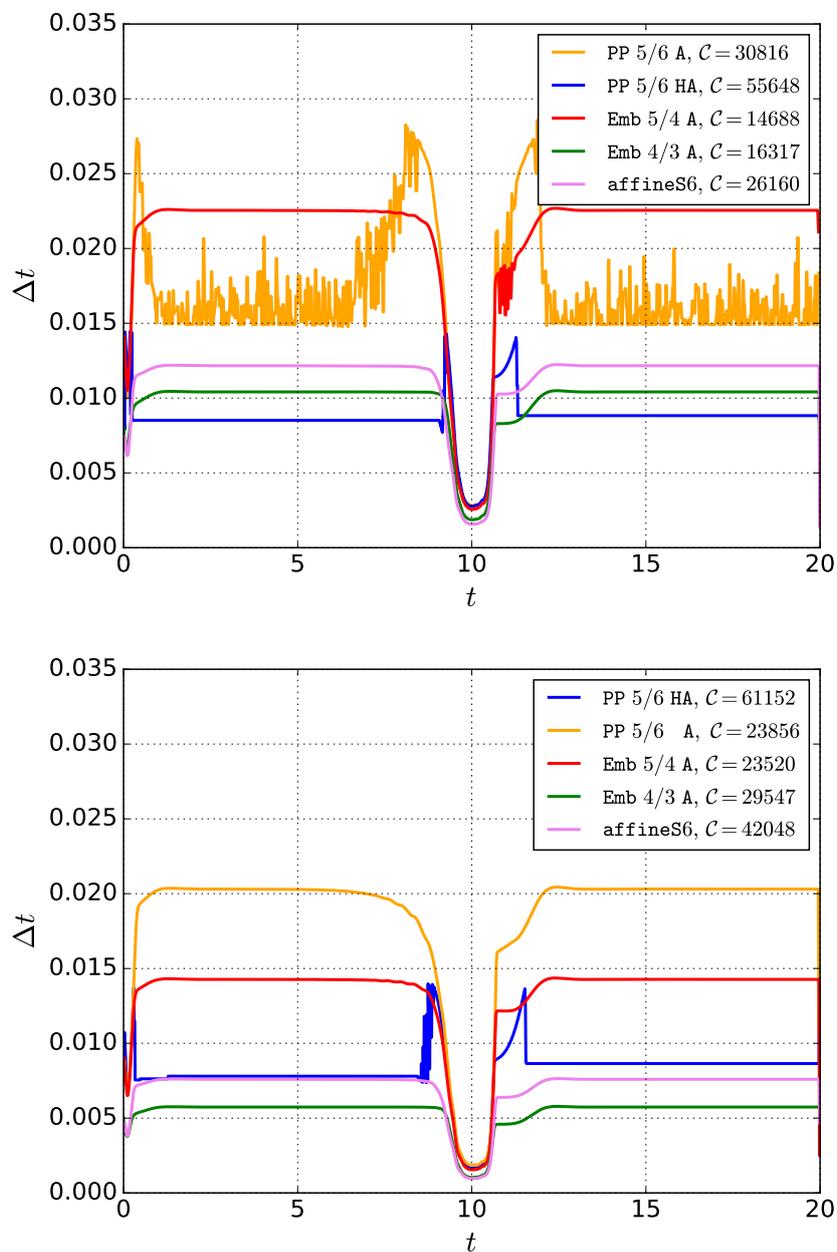


Figura 6.12: (Arriba) Tamaño de paso Δt en función del tiempo t para los esquemas comparados. En todos los casos, la tolerancia absoluta exigida para el error local es $\tau = 10^{-6}$ (Abajo) Idem para $\tau = 10^{-7}$. Misma solución de la Figura 6.11.

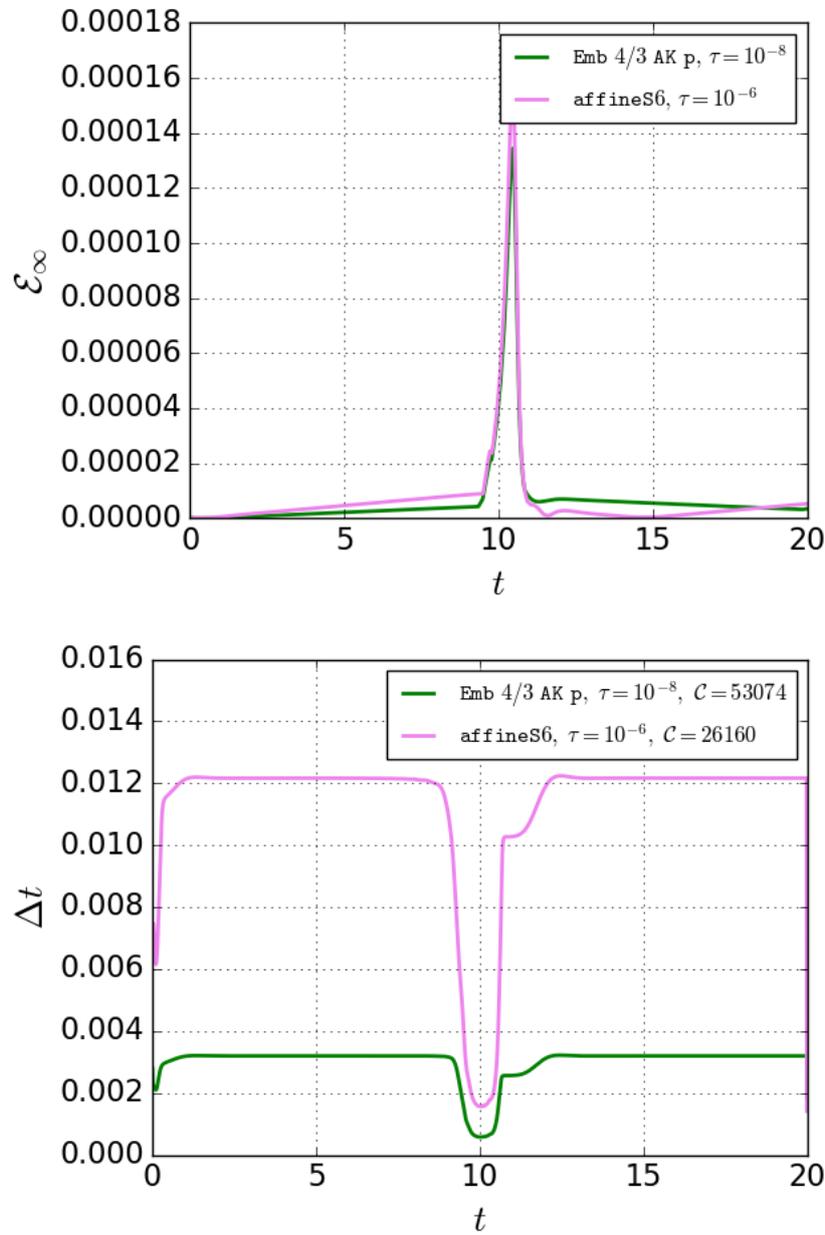


Figura 6.13: (Arriba) Error global \mathcal{E}_∞ en función del tiempo t para los esquemas adaptativos Emb 4/3 AK p (con tolerancia $\tau = 10^{-8}$, curva verde) y affineS6 (con tolerancia $\tau = 10^{-6}$, curva violeta) respecto de la solución de referencia calculada mediante un método Dormand–Prince 8(5,3) con tolerancia absoluta $\text{atol} = 10^{-14}$. La leyenda indica el costo computacional C correspondiente. (Abajo) Tamaño de paso Δt en función de t para los mismos esquemas.

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas

A lo largo de esta tesis hemos investigado, desarrollado e implementado un conjunto de esquemas de solución numérica para ecuaciones de evolución en derivadas parciales. En particular, estudiamos y aportamos resultados novedosos dentro del campo de los métodos de descomposición (*splitting*) de operadores, profundizando especialmente en las características y propiedades de los esquemas afines de descomposición. Mostramos la eficiencia, versatilidad y fiabilidad de los métodos propuestos resolviendo numéricamente un conjunto de ecuaciones de evolución no lineales, tanto conservativas como disipativas, entre ellas ecuaciones de Schrödinger no lineales y ecuaciones complejas de Ginzburg–Landau. Estas ecuaciones han surgido como modelos físicos en problemas de óptica no lineal, hidrodinámica, ondas en plasmas, átomos fríos y fenómenos cuánticos como la condensación de Bose–Einstein, entre otros. Nuestro marco teórico y las herramientas computacionales elaboradas para la concreción de este trabajo permitieron abordar desde una perspectiva numérica diversas instancias de estos modelos, incluyendo casos de interés actual como variantes fraccionarias (no locales), objeto de estudios recientes tanto teóricos como experimentales. Destacamos que los métodos numéricos presentados en esta tesis son adecuados para complementar y retroalimentar desde el punto de vista computacional las investigaciones analíticas y empíricas en curso.

La eficiencia y exactitud de los métodos afines de descomposición fue puesta en evidencia a lo largo del Capítulo 5 en el que el desempeño de los mismos se contrastó favorablemente con el de los tradicionales esquemas de descomposición multiplicativos. Mostramos en el caso de problemas hamiltonianos que la elevada exactitud de los métodos afines permite preservar invariantes como la masa y el hamiltoniano razonablemente bien, dentro de los límites de la aritmética de doble precisión. En el caso de problemas disipativos, los métodos afines exhibieron, además de la eficiencia y exactitud mencionadas, una estabilidad numérica de la que no gozan en general los esquemas multiplicativos de alto orden, según quedó evidenciado en los ejemplos numéricos analizados. Aunque la inestabilidad numérica de los métodos multiplicativos es salvable en problemas irreversibles particulares, como ha sido mostrado muy recientemente en la literatura para esquemas de orden tres y cuatro, esto solo puede ser resultado de un análisis caso por caso para esquemas específicos y nunca está garantizado a priori. En contraste, los métodos afines resultan, por su propia construcción, adecuados a problemas rever-

sibles e irreversibles indistintamente, por lo que pueden adoptarse como integradores basados en descomposición de propósito general. Adicionalmente, como consecuencia de su estructura basada en extrapolaciones sucesivas, identificamos la posibilidad de incorporar optimizaciones como procesamiento paralelo y adaptatividad temporal. En particular, mediante el desarrollo presentado en el Capítulo 6 logramos incrementar la eficiencia de los métodos afines incorporando técnicas de adaptatividad temporal, exponiendo una vez más que su desempeño supera en términos de eficiencia, exactitud y estabilidad al de esquemas multiplicativos adaptativos que constituyen el estado del arte en la materia.

Como aporte adicional de nuestro trabajo, desarrollamos herramientas de *software* que hemos puesto a disposición de la comunidad y que permiten no solo reproducir y validar los resultados obtenidos sino también facilitar la construcción de nuevos métodos y la evaluación de modelos distintos a los aquí analizados.

Consideramos que los resultados alcanzados no solo son alentadores en virtud del buen desempeño de los métodos investigados, sino también de su simplicidad conceptual y de la sistematicidad de su construcción. Esta simplicidad permite identificar generalizaciones inmediatas, como la construcción de métodos de orden arbitrario basados en descomposiciones con más de dos operadores, cuya versión en términos de esquemas multiplicativos resulta más compleja porque requiere la búsqueda de coeficientes específicos para cada orden y número de operadores.

Como consecuencia del recorrido realizado y los problemas tratados, numerosos aspectos surgieron como potenciales ampliaciones de los métodos propuestos, entre ellos:

- la implementación de esquemas afines que admitan descomposiciones con tres o más operadores;
- la adopción de técnicas de computación paralela de los propagadores, posibilidad abierta por la propia estructura de los esquemas afines de descomposición pero impracticable en los multiplicativos debido a su secuencialidad intrínseca;
- la extensión de los métodos para su aplicación a problemas de dimensionalidad mayor, aspecto que en algunos sistemas de coordenadas puede resultar más o menos inmediato si se dispone de una base de funciones adecuada para expresar la solución mediante una discretización pseudoespectral;
- estrechamente relacionado con el punto anterior, la posibilidad de complementar los esquemas aditivos de descomposición temporal con otras técnicas de discretización de la variable espacial, como diferencias finitas, elementos finitos y funciones de base radial;
- la implementación de técnicas de adaptatividad espacial y espectral mediante bases dependientes del tiempo;
- la optimización de los códigos mediante la incorporación de técnicas de compilación JIT («just-in-time compilation»), el uso de unidades gráficas de procesamiento (GPU) y la

reescritura de las partes críticas en lenguajes más eficientes como C/C++, Fortran y/o Julia;

- la ampliación y consolidación de las herramientas computacionales desarrolladas en este trabajo bajo la forma de un paquete de software libre que provea un entorno robusto de experimentación numérica para el estudio de ecuaciones de evolución en derivadas parciales mediante métodos de descomposición;
- la incorporación de *buenas prácticas de desarrollo* (patrones de diseño, control de versiones, documentación y *testing*) al software desarrollado.

Actualmente nos encontramos avanzando en la implementación de técnicas de paralelización y de descomposición con más de dos operadores, que esperamos incrementen adicionalmente la eficiencia de los métodos afines.

Apéndices

Apéndice A

Cálculo de los propagadores no lineales

En todos los modelos considerados en este trabajo, el propagador no lineal ϕ_B es diagonal en la variable espacial. A continuación obtenemos aquellas soluciones de los propagadores no lineales que pueden obtenerse analíticamente. Estos propagadores pueden computarse numéricamente mediante una simple evaluación de funciones con costo $\mathcal{O}(N)$.

CGLE3. En el modelo CGLE3 con no linealidad cúbica, el problema parcial para el operador no lineal es

$$i\partial_t u(x, t) = (\gamma + i\varepsilon) |u(x, t)|^2 u(x, t).$$

Dado que

$$\partial_t |u|^2 = \partial_t u u^* + u \partial_t u^* = 2 \operatorname{Re}(\partial_t u u^*) = 2 \operatorname{Re}(-i(\gamma + i\varepsilon) |u|^4) = 2\varepsilon |u|^4,$$

obtenemos por integración

$$|u(x, t)|^2 = \frac{|u(x, 0)|^2}{1 - 2\varepsilon |u(x, 0)|^2 t}.$$

Si $\varepsilon \neq 0$ resulta

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \phi_B(t) u(x, 0) := u(x, 0) e^{-i(\gamma + i\varepsilon) \int_0^t |u(x, t')|^2 dt'} \\ &= u(x, 0) e^{-i(\gamma + i\varepsilon) |u(x, 0)|^2 \int_0^t (1 - 2\varepsilon |u(x, 0)|^2 t')^{-1} dt'} \\ &= u(x, 0) e^{\frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{\varepsilon} i - 1 \right) \ln(1 - 2\varepsilon |u(x, 0)|^2 t)}. \end{aligned}$$

Vemos que la evolución es posible siempre que $1 - 2\varepsilon |u(x, 0)|^2 t > 0$, lo que limita el paso máximo para el propagador no lineal a

$$t < t_3 = \frac{1}{2\varepsilon |u(x, 0)|^2},$$

dependiente del coeficiente ε y del máximo del módulo de u .

fNLSE3. Si en la fórmula anterior $\varepsilon = 0$, resulta $|u(x, t)|^2 = |u(x, 0)|^2$ y tenemos

$$u(x, t) = \phi_B(t)u(x, 0) := u(x, 0)e^{-i\gamma \int_0^t |u(x, t')|^2 dt'} = u(x, 0)e^{-i\gamma |u(x, 0)|^2 t}.$$

Observamos que este propagador no lineal conserva la masa $M = \int_{\mathbb{R}} |u(x, t)|^2 dx$.

Ecuación de Fisher. Para la ecuación de Fisher, el subproblema no lineal es $i\partial_t u(x, t) = -\beta (u(x, t))^2$ y el propagador no lineal resulta

$$u(x, t) = \phi_B(t)u(x, 0) := \frac{u(x, 0)}{1 + t\beta u(x, 0)}.$$

Apéndice B

Algoritmo de continuación numérica

Algoritmo B.1 Procedimiento para obtener las ondas estacionarias de la fNLSE3 para distintos α usando el método pseudoespectral de Fourier y continuación numérica.

```
1 from numpy import sqrt, cosh
2 from scipy.optimize import newton_krylov
3 from basis import FourierBasis
4 from state import State
5 from model import NLSE3Model1D
6
7 omega = 1
8 solutions = []
9 alphas = (2.0, 1.9, 1.8, 1.7, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3, 1.2, 1.1)
10 fourier = FourierBasis('fb', 2**15, (-300, 300))
11 x = fourier.get_grid()
12 u0_values = sqrt(2) / cosh(sqrt(2)*x)
13
14 for alpha in alphas:
15     # Crea una instancia del modelo
16     model = NLSE3Model1D(D=1, gamma=-1, alpha=alpha)
17     # Obtiene el operador A (lineal) del modelo en la base fourier
18     A_op = model.get_A_operator(fourier)
19     # Obtiene el operador B (no lineal) del modelo en la base fourier
20     B_op = model.get_B_operator(fourier)
21     # Define F
22     def F(psi):
23         return A_op(psi) + omega * psi + B_op(psi)
24     # Resuelve F = 0
25     u0_values = newton_krylov(F, u0_values, f_tol=5e-13, method='lgmres',
26                             verbose=True)
27     u0 = State('u0', fourier)
28     u0.values = u0_values
29     # Guarda el resultado
30     solutions.append(u0)
```

Apéndice C

Conservación del Hamiltoniano

Los sistemas hamiltonianos abordados en este trabajo, en particular la fNLSE3, admiten un Hamiltoniano de la forma

$$H(u) = T(u) + V(u),$$

con

$$T(u) = \frac{1}{2} (Au, u) = \frac{1}{2} (\mathcal{F}Au, \mathcal{F}u) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \mathcal{A}(k) |\mathcal{F}u(k)|^2 dk,$$

$$V(u) = \frac{\gamma}{4} (|u|^2, |u|^2) = \frac{\gamma}{4} \int_{\mathbb{R}} |u|^4 dx.$$

Dicho funcional es una constante de movimiento. En efecto

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= \frac{\gamma}{4} \frac{d}{dt} (|u|^2, |u|^2) \\ &= \frac{\gamma}{4} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} |u|^2 |u|^2 dx \\ &= \frac{\gamma}{4} \int_{\mathbb{R}} 2\partial_t (|u|^2) |u|^2 dx \\ &= \frac{\gamma}{2} \int_{\mathbb{R}} [(\partial_t u) u^* + u (\partial_t u^*)] |u|^2 dx \\ &= \frac{\gamma}{2} \int_{\mathbb{R}} 2 \operatorname{Re} [(\partial_t u) |u|^2 u^*] dx \\ &= \gamma \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}} (\partial_t u) |u|^2 u^* dx \\ &= \operatorname{Re} (\partial_t u, \gamma |u|^2 u) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dT}{dt} &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (Au, u) \\
&= \frac{1}{4} \frac{d}{dt} [(Au, u) + (u, Au)] \\
&= \frac{1}{4} \frac{d}{dt} 2 \operatorname{Re} (u, Au) \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\frac{d}{dt} (u, Au) \right] \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} [(\partial_t u, Au) + (u, \partial_t Au)] \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} [(\partial_t u, Au) + (u, A\partial_t u)] \\
&= \frac{1}{2} \operatorname{Re} [(\partial_t u, Au) + (Au, \partial_t u)] \\
&= \operatorname{Re} [(\partial_t u, Au)]
\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{dt} &= \frac{dT}{dt} + \frac{dV}{dt} \\
&= \operatorname{Re} [(\partial_t u, Au) + (\partial_t u, \gamma |u|^2 u)] \\
&= \operatorname{Re} (\partial_t u, Au + \gamma |u|^2 u) \\
&= \operatorname{Re} (\partial_t u, -i\partial_t u) \\
&= \operatorname{Re} [-i \|\partial_t u\|_2^2] \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Bibliografía

- Ablowitz, M. J. (2011). *Nonlinear Dispersive Waves: Asymptotic Analysis and Solitons*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CB09780511998324>
- Agrawal, G. (2019). *Nonlinear Fiber Optics* (6th ed.). Academic Press.
- Akhmediev, N. & Ankiewicz, A. (2001). Solitons of the complex Ginzburg–Landau equation. *Spatial Solitons*, 311–341. Springer Berlin Heidelberg.
- Akhmediev, N. & Ankiewicz, A. (2008). *Dissipative Solitons: From Optics to Biology and Medicine*. Springer Science & Business Media.
- Akhmediev, N., Soto-Crespo, J. M., & Town, G. (2001). Pulsating solitons, chaotic solitons, period doubling, and pulse coexistence in mode-locked lasers: Complex Ginzburg-Landau equation approach. *Phys. Rev. E*, 63, 056602. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.63.056602>
- Akhmediev, N. N., Afanasjev, V. V., & Soto-Crespo, J. M. (1996). Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginzburg-Landau equation. *Phys. Rev. E*, 53, 1190–1201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.53.1190>
- Al Khawaja, U. & Al Sakkaf, L. (2019). *Handbook of Exact Solutions to the Nonlinear Schrödinger Equations*. IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/978-0-7503-2428-1>
- Al-Mohy, A. H. & Higham, N. J. (2010). A new scaling and squaring algorithm for the matrix exponential. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 31(3), 970–989. <https://doi.org/10.1137/09074721X>
- Antoine, X., Bao, W., & Besse, C. (2013). Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross–Pitaevskii equations. *Computer Physics Communications*, 184(12), 2621–2633.
- Aranson, I. S. & Kramer, L. (2002). The world of the complex Ginzburg-Landau equation. *Rev. Mod. Phys.*, 74, 99–143. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.74.99>
- Arnol'd, V. I. (1989). *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (2nd ed.). Springer Science & Business Media.

- Ascher, U. M. (2008). *Numerical Methods for Evolutionary Differential Equations*. SIAM.
- Ascher, U. M. & Petzold, L. R. (1998). *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*. SIAM.
- Auzinger, W., Brezinová, I., Hofstätter, H., Koch, O., & Quell, M. (2019). Practical splitting methods for the adaptive integration of nonlinear evolution equations. Part II: Comparisons of local error estimation and step-selection strategies for nonlinear Schrödinger and wave equations. *Computer Physics Communications*, 234, 55–71. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.08.003>
- Auzinger, W., Hofstätter, H., Ketcheson, D., & Koch, O. (2017). Practical splitting methods for the adaptive integration of nonlinear evolution equations. Part I: Construction of optimized schemes and pairs of schemes. *BIT Numerical Mathematics*, 57, 55–74.
- Auzinger, W. & Koch, O. (Accessed April 7, 2023). *Coefficients of various splitting methods*. <http://www.asc.tuwien.ac.at/~winfried/splitting/>.
- Bao, W., Jaksch, D., & Markowich, P. A. (2003). Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation. *Journal of Computational Physics*, 187(1), 318–342. [https://doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00102-5](https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00102-5)
- Bao, W. & Shen, J. (2005). A fourth-order time-splitting Laguerre-Hermite pseudospectral method for Bose-Einstein condensates. *SIAM J. Sci. Comp.*, 26(6), 2010–2028.
- Batchelor, G. K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CB09780511800955>
- Behnel, S., Bradshaw, R., Citro, C., Dalcin, L., Seljebotn, D. S., & Smith, K. (2010). Cython: The best of both worlds. *Computing in Science & Engineering*, 13(2), 31–39.
- Blanes, S. & Casas, F. (2005). On the necessity of negative coefficients for operator splitting schemes of order higher than two. *Applied Numerical Mathematics*, 54(1), 23–37.
- Blanes, S. & Casas, F. (2017). *A Concise Introduction to Geometric Numerical Integration*. CRC Press.
- Blanes, S., Casas, F., & Murua, A. (2008). Splitting and composition methods in the numerical integration of differential equations. *SeMA Journal: Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada*, 45, 89–146.
- Blanes, S., Casas, F., & Murua, A. (2010). Splitting methods with complex coefficients. *SeMA Journal: Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada*, 50(1), 47–60.
- Borgna, J. P., Leo, M. D., Rial, D., & de la Vega, C. S. (2015). General splitting methods for abstract semilinear evolution equations. *Commun. Math. Sci.*, 13(1), 83–101.

- Bourquin, R. & Gradinaru, V. (2016). Asymptotic approximation of high order wavepackets. *ETH Zurich Research Reports*, 2016.
- Boyd, J. P. (2000). *Chebyshev and Fourier Spectral Methods* (2nd ed.). Dover.
- Brezis, H. & Browder, F. (1998). Partial differential equations in the 20th century. *Advances in Mathematics*, 135(1), 76–144. <https://doi.org/10.1006/aima.1997.1713>
- Bunck, B. (2009). A fast algorithm for evaluation of normalized Hermite functions. *BIT Numer. Math.*, 49, 281–295.
- Butcher, J. C. (2016). *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons.
- Calvo, M. P. & Sanz-Serna, J. M. (1993). The development of variable-step symplectic integrators, with application to the two-body problem. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(4), 936–952.
- Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A., & Zang, T. A. (2007). *Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains*. Springer Science & Business Media.
- Carretero-González, R., Frantzeskakis, D., & Kevrekidis, P. (2008). Nonlinear waves in Bose–Einstein condensates: physical relevance and mathematical techniques. *Nonlinearity*, 21(7), R139.
- Castella, F., Chartier, P., Descombes, S., & Vilmart, G. (2009). Splitting methods with complex times for parabolic equations. *BIT Numerical Mathematics*, 49, 487–508.
- Cazenave, T. & Haraux, A. (1998). *An Introduction to Semilinear Evolution Equations*. Oxford University Press.
- Cervi, J. & Spiteri, R. J. (2018). High-order operator splitting for the bidomain and monodomain models. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 40(2), A769–A786.
- Cervi, J. & Spiteri, R. J. (2019). A comparison of fourth-order operator splitting methods for cardiac simulations. *Applied Numerical Mathematics*, 145, 227–235.
- Chambers, J. (2003). Symplectic integrators with complex time steps. *The Astronomical Journal*, 126(2), 1119.
- Chou, T., Shao, S., & Xia, M. (2023). Adaptive Hermite spectral methods in unbounded domains. *Applied Numerical Mathematics*, 183, 201–220. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2022.09.003>
- Cundiff, S. T., Soto-Crespo, J. M., & Akhmediev, N. (2002). Experimental evidence for soliton explosions. *Physical Review Letters*, 88(7), 073903.
- Dalcin, L. & Fang, Y.-L. L. (2021). mpi4py: Status update after 12 years of development. *Computing in Science & Engineering*, 23(4), 47–54.

- De Leo, M., Rial, D., & Sánchez de la Vega, C. (2016). High-order time-splitting methods for irreversible equations. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 36(4), 1842–1866.
- Douglas, J. & Rachford, H. H. (1956). On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables. *Transactions of the American Mathematical Society*, 82(2), 421–439.
- Drazin, P. G. & Johnson, R. S. (1989). *Solitons: An Introduction*. Cambridge University Press.
- Duo, S. & Zhang, Y. (2016). Mass-conservative Fourier spectral methods for solving the fractional nonlinear Schrödinger equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 71(11), 2257–2271. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.12.042>
- Fermi, E., Pasta, P., Ulam, S., & Tsingou, M. (1955). Studies of the nonlinear problems. Technical report, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States).
- Ferreira, M. F. (2022). *Dissipative Optical Solitons*. Springer Nature.
- Fisher, R. A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Eugenics*, 7(4), 355–369.
- Forest, E. (2006). Geometric integration for particle accelerators. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39(19), 5321.
- Forest, E. & Ruth, R. D. (1990). Fourth-order symplectic integration. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 43(1), 105–117.
- Fornberg, B. (1996). *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. Cambridge University Press.
- Fornberg, B. & Flyer, N. (2015). Solving PDEs with radial basis functions. *Acta Numerica*, 24, 215–258.
- Fourier, J. B. J. (2009). *The Analytical Theory of Heat*. Cambridge Library Collection - Mathematics. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CB09780511693205>
- Frank, R. L. & Lenzmann, E. (2013). Uniqueness of non-linear ground states for fractional Laplacians in \mathbb{R} . *Acta Mathematica*, 210(2), 261 – 318. <https://doi.org/10.1007/s11511-013-0095-9>
- Gantmacher, F. R. (1980). *Lezioni di meccanica analitica*. Editori Riuniti.
- García-Morales, V. & Krischer, K. (2012). The complex Ginzburg–Landau equation: an introduction. *Contemporary Physics*, 53(2), 79–95. <https://doi.org/10.1080/00107514.2011.642554>
- Gardner, C. S., Greene, J. M., Kruskal, M. D., & Miura, R. M. (1967). Method for solving the Korteweg–deVries equation. *Physical Review Letters*, 19(19), 1095.

- Gauckler, L. (2011). Convergence of a split-step Hermite method for the Gross–Pitaevskii equation. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 31, 396–415.
- Gladwell, I., Shampine, L., & Brankin, R. (1987). Automatic selection of the initial step size for an ODE solver. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 18(2), 175–192.
- Glowinski, R., Osher, S. J., & Yin, W. (2017). *Splitting Methods in Communication, Imaging, Science, and Engineering*. Springer.
- Goldman, D. & Kaper, T. J. (1996). N-th order operator splitting schemes and nonreversible systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(1), 349–367.
- Goldstein, H., Poole, C., & Safko, J. (2002). *Classical Mechanics* (3rd ed.). Addison Wesley.
- Granger, B. E. & Pérez, F. (2021). Jupyter: Thinking and storytelling with code and data. *Computing in Science & Engineering*, 23(2), 7–14.
- Greiner, W. (2012). *Classical Electrodynamics*. Springer Science & Business Media.
- Grelu, P. & Akhmediev, N. (2012). Dissipative solitons for mode-locked lasers. *Nature Photonics*, 6(2), 84–92.
- Guo, B. & Huang, D. (2012). Existence and stability of standing waves for nonlinear fractional Schrödinger equations. *Journal of Mathematical Physics*, 53(8), 083702. <https://doi.org/10.1063/1.4746806>
- Gustafsson, K. (1991). Control theoretic techniques for stepsize selection in explicit Runge-Kutta methods. *ACM Trans. Math. Softw.*, 17(4), 533–554. <https://doi.org/10.1145/210232.210242>
- Gustafsson, K., Lundh, M., & Söderlind, G. (1988). A PI stepsize control for the numerical solution of ordinary differential equations. *BIT Numerical Mathematics*, 28, 270–287.
- Hairer, E., Lubich, C., & Wanner, G. (2006). *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer Science & Business Media.
- Hairer, E., Nørsett, S. P., & Wanner, G. (1993). *Solving Ordinary Differential Equations. I* (2nd ed.). Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag, Berlin. Nonstiff problems.
- Hairer, E. & Wanner, G. (2010). *Solving Ordinary Differential Equations. II*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer-Verlag, Berlin. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-05221-7>. Stiff and differential-algebraic problems
- Hall, B. C. (2013). *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer.
- Hamdi, S., Schiesser, W. E., & Griffiths, G. W. (2007). Method of lines. *Scholarpedia*, 2(7), 2859. <https://doi.org/10.4249/scholarpedia.2859>. revision #124335

- Hansen, E. & Ostermann, A. (2009). High order splitting methods for analytic semigroups exist. *BIT Numerical Mathematics*, 49(3), 527–542.
- Harris, C. R., Millman, K. J., Van Der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., et al. (2020). Array programming with NumPy. *Nature*, 585(7825), 357–362.
- Hasegawa, A. & Tappert, F. (1973). Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. I. Anomalous dispersion. *Applied Physics Letters*, 23(3), 142–144.
- Hesthaven, J. S., Gottlieb, S., & Gottlieb, D. (2007). *Spectral Methods for Time-Dependent Problems*. Cambridge University Press.
- Higham, N. J. & Tisseur, F. (2000). A block algorithm for matrix 1-norm estimation, with an application to 1-norm pseudospectra. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 21(4), 1185–1201. <https://doi.org/10.1137/S0895479899356080>
- Hirsch, M. W., Smale, S., & Devaney, R. L. (2012). *Differential Equations, Dynamical Systems, and an Introduction to Chaos*. Academic Press.
- Holden, H., Karlsen, K. H., & Lie, K.-A. (2010). *Splitting Methods for Partial Differential Equations with Rough Solutions: Analysis and MATLAB Programs*. European Mathematical Society.
- Hundsdorfer, W. H. & Verwer, J. G. (2003). *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer.
- Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in science & engineering*, 9(03), 90–95.
- IEEE (2019). IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic. *IEEE Std 754-2019 (Revision of IEEE 754-2008)*, 1–84. <https://doi.org/10.1109/IEEESTD.2019.8766229>
- Jackson, J. D. (1998). *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- Johnson, C. (2012). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Dover.
- Klein, C., Sparber, C., & Markowich, P. (2014). Numerical study of fractional nonlinear Schrödinger equations. *Proc. R. Soc. A*, 470, 0364.
- Kluyver, T., Ragan-Kelley, B., Pérez, F., Granger, B. E., Bussonnier, M., Frederic, J., Kelley, K., Hamrick, J. B., Grout, J., Corlay, S., et al. (2016). Jupyter notebooks—a publishing format for reproducible computational workflows. *Elpub*, 2016, 87–90.
- Knoll, D. A. & Keyes, D. E. (2004). Jacobian-free Newton–Krylov methods: a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, 193(2), 357–397.

- Koch, O., Neuhauser, C., & Thalhammer, M. (2013). Embedded exponential operator splitting methods for the time integration of nonlinear evolution equations. *Applied Numerical Mathematics*, 63, 14–24. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2012.09.002>
- Komarov, A., Leblond, H., & Sanchez, F. (2005). Quintic complex Ginzburg-Landau model for ring fiber lasers. *Physical Review E*, 72(2), 025604.
- Kopriva, D. A. (2009). *Implementing Spectral Methods for Partial Differential Equations: Algorithms for Scientists and Engineers*. Springer Science & Business Media.
- Korteweg, D. J. & de Vries, G. (1895). On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary waves. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 39(240), 422–443. <https://doi.org/10.1080/14786449508620739>
- Kwaśnicki, M. (2017). Ten equivalent definitions of the fractional Laplace operator. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 20(1), 7–51.
- Lam, S. K., Pitrou, A., & Seibert, S. (2015). Numba: A LLVM-based Python JIT compiler. *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC*, 1–6.
- Lanczos, C. (1970). *The Variational Principles of Mechanics* (4th ed.). Dover Publications.
- Langtangen, H. P. (2008). *Python Scripting for Computational Science*. Springer.
- Laskin, N. (2000). Fractional quantum mechanics. *Phys. Rev. E*, 62, 3135–3145. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.3135>
- Leimkuhler, B. & Reich, S. (2004). *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge University Press.
- Liu, S., Zhang, Y., Malomed, B. A., & Karimi, E. (2023). Experimental realisations of the fractional Schrödinger equation in the temporal domain. *Nature Communications*, 14(1), 222.
- Longhi, S. (2015). Fractional Schrödinger equation in optics. *Opt. Lett.*, 40(6), 1117–1120. <https://doi.org/10.1364/OL.40.001117>
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow. *Journal of Atmospheric Sciences*, 20(2), 130–141.
- Ma, H., Sun, W., & Tang, T. (2005). Hermite spectral methods with a time-dependent scaling for parabolic equations in unbounded domains. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(1), 58–75. <https://doi.org/10.1137/S0036142903421278>
- Mao, Z. & Shen, J. (2017). Hermite spectral methods for fractional PDEs in unbounded domains. *SIAM J. Sci. Comput.*, 39(5), A1928–A1950.

- Marchuk, G. (1990). Splitting and alternating direction methods. *Handbook of Numerical Analysis*, 197–462. Elsevier. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1570-8659\(05\)80035-3](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1570-8659(05)80035-3)
- Marchuk, G. I. (1968). Some application of splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems. *Aplikace matematiky*, 13(2), 103–132.
- McKinney, W. et al. (2010). Data structures for statistical computing in Python. *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*, volume 445, 51–56.
- McLachlan, R. I., Reinout, G., & Quispel, W. (2002). Splitting methods. *Acta Numerica*, 11, 341–434.
- Meurer, A., Smith, C. P., Paprocki, M., Čertík, O., Kirpichev, S. B., Rocklin, M., Kumar, A., Ivanov, S., Moore, J. K., Singh, S., et al. (2017). SymPy: symbolic computing in Python. *PeerJ Computer Science*, 3, e103.
- Mollenauer, L. F. & Gordon, J. P. (2006). *Solitons in Optical Fibers: Fundamentals and Applications*. Elsevier.
- Mollenauer, L. F., Stolen, R. H., & Gordon, J. P. (1980). Experimental observation of picosecond pulse narrowing and solitons in optical fibers. *Physical Review Letters*, 45(13), 1095.
- Morton, K. W. & Mayers, D. F. (2005). *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction*. Cambridge University Press.
- Muslu, G. M. & Erbay, H. (2005). Higher-order split-step Fourier schemes for the generalized nonlinear Schrödinger equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 67(6), 581–595.
- Neri, F. (1987). Lie algebras and canonical integration. *Department of Physics report, University of Maryland*.
- Newton, I. (2011). *Principios matemáticos de la filosofía natural*. Alianza Editorial.
- Oliphant, T. E. (2007). Python for scientific computing. *Computing in science & engineering*, 9(3), 10–20.
- Pathria, D. & Morris, J. L. (1990). Pseudo-spectral solution of nonlinear Schrödinger equations. *Journal of Computational Physics*, 87(1), 108–125.
- Peaceman, D. W. & Rachford, Jr, H. H. (1955). The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 3(1), 28–41.
- Perez, F., Granger, B. E., & Hunter, J. D. (2010). Python: an ecosystem for scientific computing. *Computing in Science & Engineering*, 13(2), 13–21.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. (2007). *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing* (3rd ed.). Cambridge University Press.

- Purwins, H.-G., Bödeker, H., & Amiranashvili, S. (2010). Dissipative solitons. *Advances in Physics*, 59(5), 485–701. <https://doi.org/10.1080/00018732.2010.498228>
- Qiu, Y., Malomed, B. A., Mihalache, D., Zhu, X., Zhang, L., & He, Y. (2020). Soliton dynamics in a fractional complex Ginzburg-Landau model. *Chaos, Solitons & Fractals*, 131, 109471. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.109471>
- Raviola, L. (2023). Code repository for the paper. <https://github.com/raviola/pseudosplit-paper/>.
- Raviola, L. A. & De Leo, M. F. (2015). Buen planteo para una ecuación de Schrödinger no elíptica. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial*, 5, 105–107. <https://asamaci.org.ar/wp-content/uploads/2021/06/MACI-Vol-5-2015.pdf>
- Raviola, L. A. & De Leo, M. F. (2017). Tratamiento numérico para una ecuación de Schrödinger no elíptica. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial*, 6, 40–43. <https://asamaci.org.ar/wp-content/uploads/2021/06/MACI-Vol-6-2017.pdf>
- Raviola, L. A. & De Leo, M. F. (2023). Desempeño de métodos de descomposición afín en ecuaciones fraccionarias de Ginzburg-Landau. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial*, 9, 55–58. https://drive.google.com/file/d/1_ZIMTLJHKsYQd8Ltdq-pKL2SzWlNjeYb
- Raviola, L. A. & De Leo, M. F. (2024). Performance of affine-splitting pseudo-spectral methods for fractional complex ginzburg-landau equations. *Applied Mathematics and Computation*, 466, 128428. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2023.128428>
- Raviola, L. A., Huenchul, C., & De Leo, M. F. (2023). Caracterización de soluciones no triviales para un sistema de ecuaciones de Ginzburg-Landau débilmente acopladas: estudio numérico. *Matemática Aplicada, Computacional e Industrial*, 9, 114–117. https://drive.google.com/file/d/1_ZIMTLJHKsYQd8Ltdq-pKL2SzWlNjeYb
- Renninger, W., Chong, A., & Wise, F. (2008). Dissipative solitons in normal-dispersion fiber lasers. *Physical Review A*, 77(2), 023814.
- Richardson, L. F. (1911). The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 210(459-470), 307–357.
- Richardson, L. F. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press.
- Richardson, L. F. & Gaunt, J. A. (1927). The deferred approach to the limit. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, 226(636-646), 299–361.
- Rockmore, D. N. (2000). The FFT: an algorithm the whole family can use. *Computing in Science & Engineering*, 2(1), 60–64.

- Russell, J. S. (1844). Report on waves. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh*, volume 319.
- Ruth, R. D. (1983). A canonical integration technique. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 30(4), 2669–2671. <https://doi.org/10.1109/TNS.1983.4332919>
- Sanz-Serna, J.-M. & Calvo, M.-P. (1994). *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall.
- Sari, M. (2015). Fisher's equation. *Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics*, 550–553. Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-540-70529-1_340
- Schrödinger, E. (2003). *Collected Papers on Wave Mechanics*. AMS Chelsea Publishing Series. AMS Chelsea Publishing.
- Shabat, A. & Zakharov, V. (1972). Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media. *Sov. Phys. JETP*, 34(1), 62.
- Shen, J., Tang, T., & Wang, L.-L. (2011). *Spectral Methods - Algorithms, Analysis and Applications*. Springer.
- Söderlind, G. (2002). Automatic control and adaptive time-stepping. *Numerical Algorithms*, 31, 281–310.
- Söderlind, G. (2003). Digital filters in adaptive time-stepping. *ACM Trans. Math. Softw.*, 29(1), 1–26. <https://doi.org/10.1145/641876.641877>
- Söderlind, G. (2006). Time-step selection algorithms: Adaptivity, control, and signal processing. *Applied Numerical Mathematics*, 56(3), 488–502. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2005.04.026>
- Söderlind, G. & Wang, L. (2006). Adaptive time-stepping and computational stability. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 185(2), 225–243. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2005.03.008>
- Stillfjord, T. (2018). Adaptive high-order splitting schemes for large-scale differential Riccati equations. *Numerical Algorithms*, 78(4), 1129–1151.
- Strang, G. (1968). On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3), 506–517. <https://doi.org/10.1137/0705041>
- Strogatz, S. H. (2018). *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering* (2nd ed.). CRC Press.
- Sulem, C. & Sulem, P.-L. (1999). *The Nonlinear Schrödinger Equation - Self-focusing and Wave Collapse*. Springer.
- Taha, T. R. & Ablowitz, M. I. (1984). Analytical and numerical aspects of certain nonlinear evolution equations. II. Numerical, nonlinear Schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 55(2), 203–230.

- Tang, T. (1993). The Hermite spectral method for Gaussian-type functions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(3), 594–606. <https://doi.org/10.1137/0914038>
- Tang, T., Yuan, H., & Zhou, T. (2018). Hermite spectral collocation methods for fractional PDEs in unbounded domains. *Communications in Computational Physics*, 24(4), 1143–1168. <https://doi.org/10.4208/cicp.2018.hh80.12>
- Thalhammer, M. (2012). Convergence analysis of high-order time-splitting pseudospectral methods for nonlinear Schrödinger equations. *SIAM J. Num. An.*, 50(6), 3231–3258.
- Thalhammer, M. & Abhau, J. (2012). A numerical study of adaptive space and time discretisations for Gross-Pitaevskii equations. *Journal of Computational Physics*, 231(20), 6665–6681. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.05.031>
- Thalhammer, M., Caliari, M., & Neuhauser, C. (2009). High-order time-splitting Hermite and Fourier spectral methods. *Journal of Computational Physics*, 228, 822–832.
- Townsend, A., Trogdon, T., & Olver, S. (2015). Fast computation of Gauss quadrature nodes and weights on the whole real line. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 36(1), 337–358. <https://doi.org/10.1093/imanum/drv002>
- Trefethen, L. N. (2000). *Spectral Methods in MATLAB*. SIAM. <https://doi.org/10.1137/1.9780898719598>
- Trefethen, L. N. & Weideman, J. A. C. (2014). The exponentially convergent trapezoidal rule. *SIAM Review*, 56(3), 385–458. <https://doi.org/10.1137/130932132>
- Trotter, H. F. (1959). On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10(4), 545–551.
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., et al. (2020). SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature Methods*, 17(3), 261–272.
- Weideman, J. & Herbst, B. M. (1986). Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23(3), 485–507.
- Weideman, J. A. C. (2002). Numerical integration of periodic functions: A few examples. *The American Mathematical Monthly*, 109(1), 21–36. <https://doi.org/10.1080/00029890.2002.11919836>
- Weitzner, H. & Zaslavsky, G. (2003). Some applications of fractional equations. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 8(3), 273–281. [https://doi.org/10.1016/S1007-5704\(03\)00049-2](https://doi.org/10.1016/S1007-5704(03)00049-2)
- Whitham, G. B. (2011). *Linear and Nonlinear Waves*. John Wiley & Sons.

- Xia, M., Shao, S., & Chou, T. (2021). Efficient scaling and moving techniques for spectral methods in unbounded domains. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 43(5), A3244–A3268. <https://doi.org/10.1137/20M1347711>
- Yanenko, N. N. (1971). *The Method of Fractional Steps*. Springer.
- Yoshida, H. (1990). Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150(5), 262–268. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90092-3](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90092-3)
- Zabusky, N. J. & Kruskal, M. D. (1965). Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Physical Review Letters*, 15(6), 240.