Solución de la ecuación Schrödinger No lineal a través de diferencias finitas

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Presenta:
Sergio Castrillon
Juan Andres Gonzales Moncada

Contenido

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

- Introducción
- Marco teórico
  - Ecuaciones de Maxwell
  - Ecuación de schrodinger NL
  - Solución solitónica
- Método numérico
  - Desarrollo matemático
  - Implementación
- Soluciones solitónicas
- Soluciones solitónicas dispersivas
- Bibliografía

Introducción

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

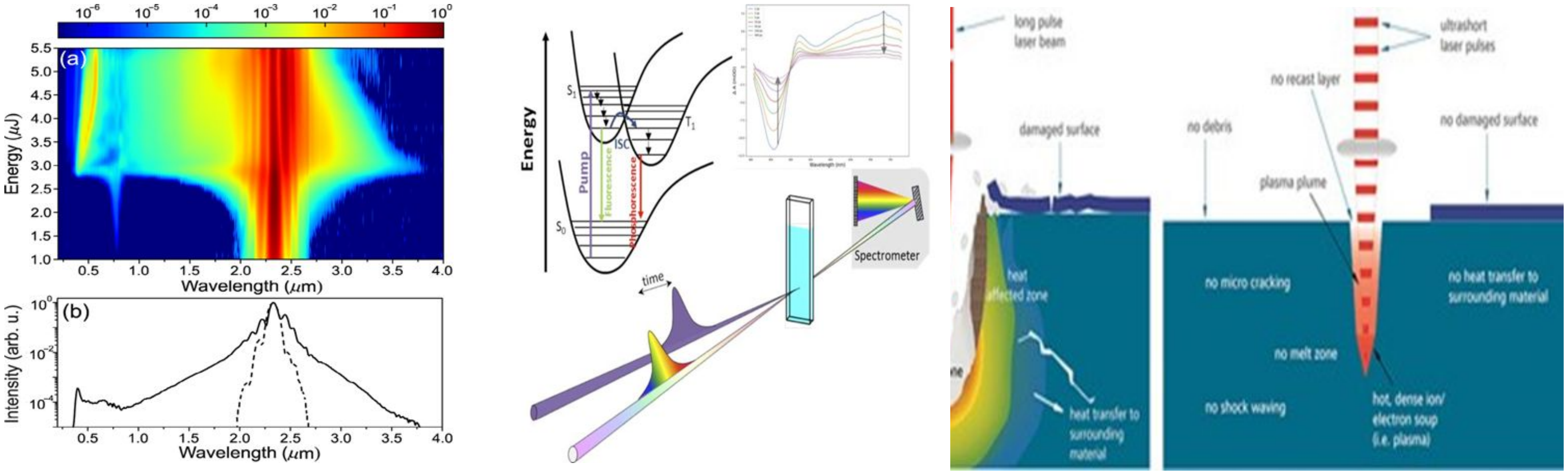


Fig 1. Diferentes aplicaciones de la generación de pulsos mode locked en a) Generación de supercontinuo [1] b) Espectroscopía [2] c) Medic

[1]. S. Venck, F. St-Hilaire, L. Brilland, A. N. Ghosh, R. Chahal and T. Sylvestre,"2–10 μm Mid-Infrared Fiber-Based Supercontinuum Laser Source: Experiment and Simulation," L (2020).

[2]. T. Gherman and D. Romanini, "Mode–locked cavity–enhanced absorption spectroscopy," Opt. Express 10, 1033–1042 (2002).

[3]. https://spie.org/news/spie-professional-magazine-archive/2011-january/lasers-in-medicine?SSO=1

Marco teórico

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P},$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M},$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}_{\mathrm{NL}}(\mathbf{r}, t)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\mathrm{f}},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}_{\mathrm{L}}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}_{\mathrm{NL}}}{\partial t^2},$$

1) Onda cuasi monocromática.
2) Polarización NL como pequeña perturbación.
3) Se mantiene la polarización en la propagación.
4) Pulsos cortos*

$$\tilde{E}(\mathbf{r}, \omega - \omega_0) = F(x, y)\, \tilde{A}(z, \omega - \omega_0) \exp(i\beta_0 z)$$

$$i\frac{\partial A}{\partial z} = -\frac{i\alpha}{2} A + \frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} - \gamma |A|^2 A,$$

Ecuación de Schrödinger NL

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

El comportamiento de la envolvente del pulso viene dado por

$$i\frac{\partial A}{\partial z} = -\frac{i\alpha}{2}A + \frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} - \gamma |A|^2 A,$$

Donde $\boldsymbol{\alpha}$ da cuenta de las pérdidas lineales del pulso, $\boldsymbol{\beta}$ da cuenta de la dispersión del pulso y γ es un parámetro de no linealidad particular del medio donde se está propagando [4]. Despreciando las pérdidas lineales se tiene un ecuación de la forma

$$i\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\beta}{2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \gamma |\phi|^2 \phi = 0 \qquad (1)$$

[4]. Agrawal, G. P. Nonlinear fiber optics. In Nonlinear Science at the Dawn of the 21st Century. (2000)

Desarrollo matemático [5]

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

Computacionalmente, buscamos resolver

$$i\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\beta}{2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \gamma|\phi|^2\phi = 0, x_L \leq x \leq x_R, t \geq 0 \qquad (2)$$

Condiciones iniciales

$$\phi(x,t) = \sqrt{\frac{2a}{\gamma}}\operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{-2a}{\beta}}(x-ct)\right)\exp\left\{i\left[\left(\frac{-c}{\beta}\right)x + \left(a + \frac{c^2}{2\beta}\right)t\right]\right\}$$

$$\phi(x,0) = g(x) \qquad (3)$$

Condiciones de frontera

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,t) = 0, \ at \ x = x_L, x_R \qquad (4)$$

Donde ϕ toma valores complejos $\phi(x,t) = v(x,t) + iw(x,t)$ (5)

[5] Alanazi, A. A. Solving nonlinear Schrodinger equation using stable implicit finite difference method in single-mode optical fibers.(2021)

Desarrollo matemático

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Por componentes tenemos

$$\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\beta}{2}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \gamma(v^2 + w^2)w = 0$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\beta}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \gamma(v^2 + w^2)v = 0 \qquad (6)$$

En notación matricial tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} - \frac{\beta}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} + \gamma\begin{pmatrix} 0 & v^2 + w^2 \\ -(v^2 + w^2) & 0 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} = \mathbf{0} \qquad (7)$$

Donde definimos

$$\boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix}, A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} - \frac{\beta}{2}A\frac{\partial^2 \boldsymbol{\phi}}{\partial x^2} + \gamma G(\boldsymbol{\phi})\boldsymbol{\phi} = \mathbf{0}. \qquad (8)$$

Discretización

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Discretizamos el espacio

$$x = x_m = x_L + (m-1)h, \qquad h = \frac{x_R - x_L}{N-1}, \; m = 1, 2, \ldots, N$$

Utilizamos la expresión de diferencia central para la segunda derivada

$$\frac{\partial^2 \phi_m}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}\left(\phi_{m-1} - 2\phi_m + \phi_{m+1}\right) \qquad (8)$$

Lo cual nos permite escribir toda la ecuación diferencial en forma iterativa

$$\dot{V}_m - \frac{\beta}{2h^2}\left(W_{m+1} - 2W_m + W_{m-1}\right) + \gamma\left(V_m^2 + W_m^2\right)W_m = 0, \; m = 1, 2, \ldots, N \qquad (9)$$

$$\dot{W}_m + \frac{\beta}{2h^2}\left(V_{m+1} - 2V_m + V_{m-1}\right) - \gamma\left(V_m^2 + W_m^2\right)V_m = 0 \qquad (10)$$

Discretización

Donde las condiciones de frontera (4) toman la forma

$$\frac{\partial V_m}{\partial x}=\frac{1}{2h}(V_{m+1}-V_{m-1})=0,$$
$$\frac{\partial W_m}{\partial x}=\frac{1}{2h}(W_{m+1}-W_{m-1})=0, \text{ when } m=1,N, \qquad (11)$$

Por lo que al despejar se puede obtener:

$$V_0=V_2, W_0=W_2, V_{N+1}=V_{N-1}, W_{N+1}=W_{N-1} \qquad (12)$$

Discretización

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Juntando todo la ecuación (9) y (10) queda como

$$\dot{\Phi} + [S + B(\Phi)]\Phi = \mathbf{0} \qquad (13)$$

Donde

$$S = \frac{\beta}{2h^2}\begin{bmatrix} 2A & -2A & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ -A & 2A & -A & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & \cdots & & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & & \ddots & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -A & 2A & -A \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & -2A & 2A \end{bmatrix}$$

$$B(\phi) = \begin{bmatrix} B_1(\phi_1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & B_2(\phi_2) & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \\ 0 \quad 0 & & \cdots & B_{m-1}(\phi_{m-1}) & 0 \\ 0 \quad 0 & & & 0 & B_m(\phi_m) \end{bmatrix}$$

Discretización

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Discretizamos el tiempo

$$t_n = nk,\ n = 0, 1, 2, \ldots,$$

E introducimos la expresión intrínseca y la derivada

$$\Phi_m^n = \frac{\Phi_m^{n+1} + \Phi_m^n}{2},\ m = 1, 2, \ldots N$$

$$\left(\dot{\Phi}\right)_m^n = \frac{\Phi_m^{n+1} - \Phi_m^n}{k}$$

Reemplazando en la ecuación matricial (13) tenemos

$$\Phi^{n+1} - \Phi^n + k\left[S + B\left(\frac{\Phi^{n+1} + \Phi^n}{2}\right)\right]\left(\frac{\Phi^{n+1} + \Phi^n}{2}\right) = \mathbf{0} \qquad (14)$$

Método de Newton

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

La ecuación (14) se puede expresar como [6]

$$\boldsymbol{F}(\phi^{n+1}) = \mathbf{0} \qquad (15)$$

Donde

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\Phi}) = \left[\boldsymbol{f}_1^T, \boldsymbol{f}_2^T, \ldots, \boldsymbol{f}_N^T\right]^T \qquad \boldsymbol{f}_m = \left[(f1)_m, (f2)_m\right]^T$$

$$\boldsymbol{\Phi} = \left[\boldsymbol{\Phi}_1^T, \boldsymbol{\Phi}_2^T, \cdots, \boldsymbol{\Phi}_N^T\right]^T \qquad \boldsymbol{\Phi}_m = \left[V_m, W_m\right]^T$$

Se puede aplicar el método de Newton para sistemas no lineales para obtener

$$\boldsymbol{\Phi}^{(j+1)} = \boldsymbol{\Phi}^{(j)} - J^{-1}\left(\boldsymbol{\Phi}^{(j)}\right)\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{\Phi}^{(j)}\right), j = 0, 1, 2, \ldots, \qquad (16)$$

[6] Ismail, M. S. Highly accurate finite difference method for coupled nonlinear Schrödinger equation. (2004)

Método de Newton

$\mathbf{J}$ es la matriz jacobiana del sistema (15). El cual viene dado por

$$J = \begin{bmatrix} A_1 & C_1 & \cdots & 0 & 0 \\ B_2 & A_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & A_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & 0 & & B_N & A_N \end{bmatrix} \qquad (17)$$

donde los bloques A_i , B_i y C_i se obtienen mediante

$$A_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial(f1)_i}{\partial V_i} & \frac{\partial(f1)_i}{\partial W_i} \\ \frac{\partial(f2)_i}{\partial V_i} & \frac{\partial(f2)_i}{\partial W_i} \end{pmatrix}, i = 1,2,...,N B_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial(f1)_i}{\partial V_{i-1}} & \frac{\partial(f1)_i}{\partial W_{i-1}} \\ \frac{\partial(f2)_i}{\partial V_{i-1}} & \frac{\partial(f2)_i}{\partial W_{i-1}} \end{pmatrix}, i = 2,3,...,N C_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial(f1)_i}{\partial V_{i+1}} & \frac{\partial(f1)_i}{\partial W_{i+1}} \\ \frac{\partial(f2)_i}{\partial V_{i+1}} & \frac{\partial(f2)_i}{\partial W_{i+1}} \end{pmatrix}, i = 1,2,...,N-1.$$

Algoritmo de Craut

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Para obtener la corrección la ecuación (17) resolvemos el sistema

$$J\left(\Phi^{(j)}\right)\boldsymbol{y}=\boldsymbol{F}\left(\Phi^{(j)}\right),\ j=0,1\ldots, \qquad (18)$$

Y dado que el jacobiano es tridiagonal por bloques resolvemos el sistema utilizando el método de Craut por bloques

$$L=\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \qquad U=\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

[7] Burden, A. M. Numerical analysis. (2015).

Pseudocódigo

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

- Definir las condiciones iniciales $\boldsymbol{\phi}^{0}$ mediante la función $g(x)$
- Para cada paso n en el tiempo
  - Definir una primera aproximación $\boldsymbol{\phi}^{n+1} = \boldsymbol{\phi}^{n}$
    - Definir el sistema $\mathbf{J}y = F(y)$
    - Obtener una corrección y resolviendo el sistema con factorización LU
    - $\boldsymbol{\phi}^{(j+1)} = \boldsymbol{\phi}^{(j)} - y$
    - Repetir este proceso hasta que la corrección tienda a 0

Soluciones solitónicas.

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

a)

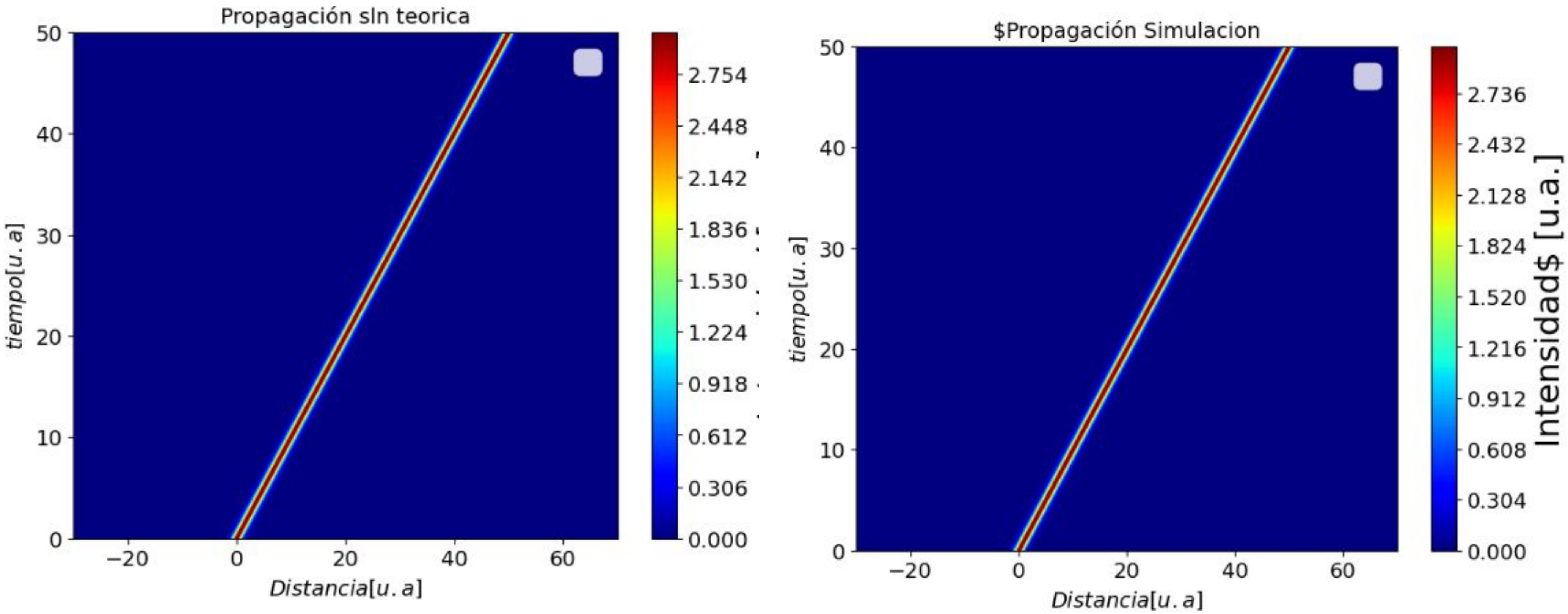


Fig. 2 a) Propagación de la solución teórica y b) De la solución numérica, para $\boldsymbol{\beta}$=-1, γ =2/3

Soluciones solitónicas.

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

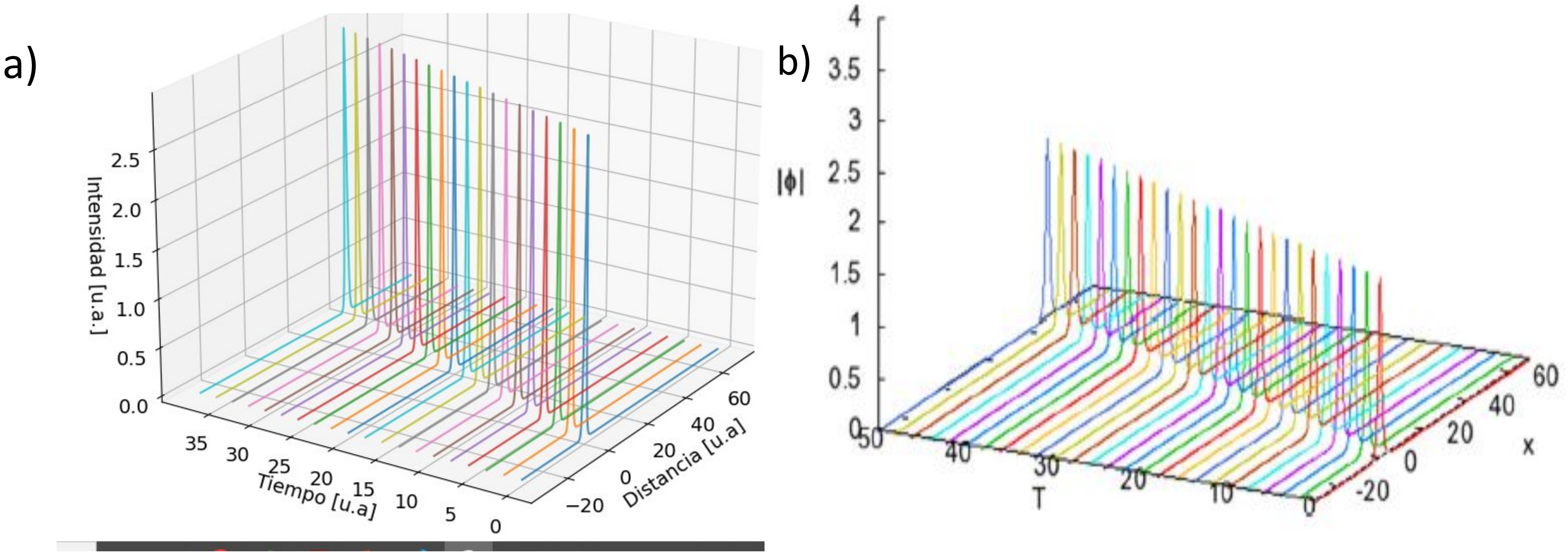


Fig. 2 a) Propagación de la solución teórica y b) De la solución numérica, para β=-1, γ =2/3

Soluciones solitónicas.

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

a)

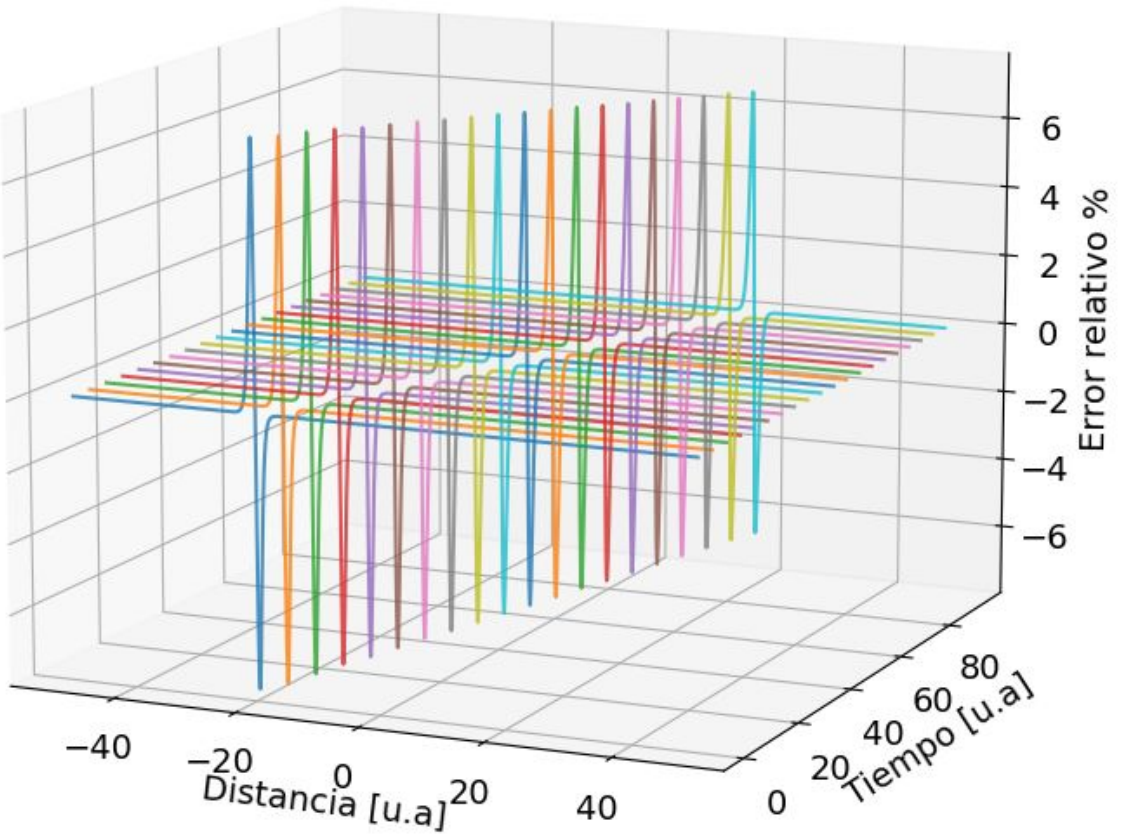
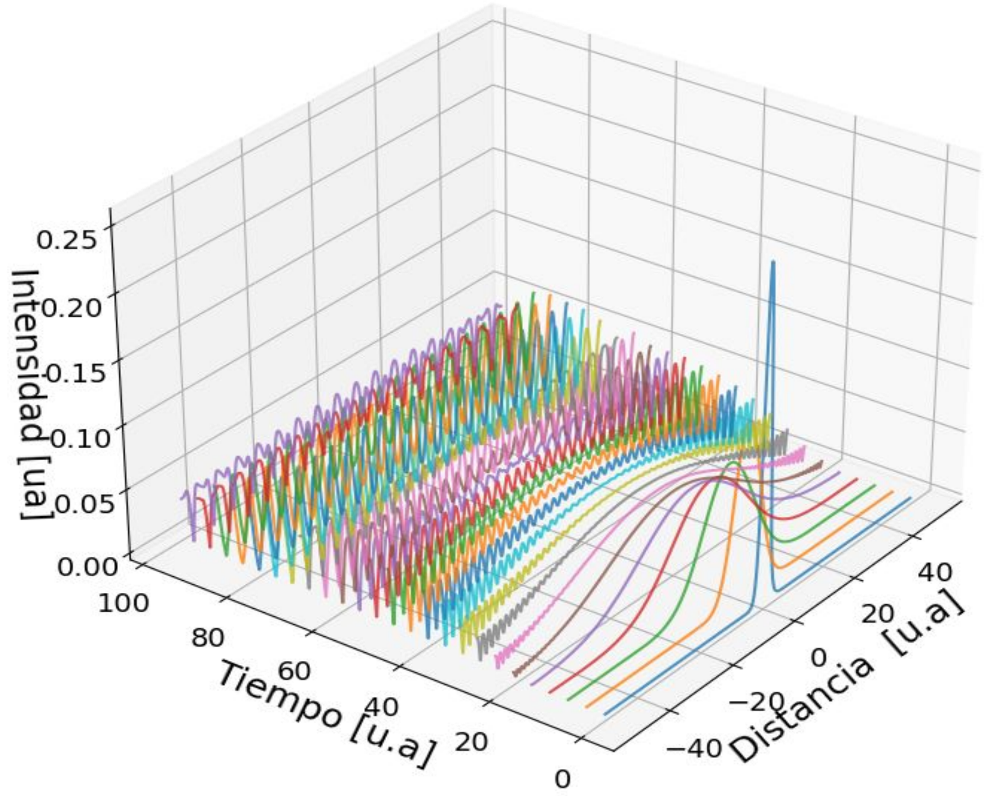


Fig. 3 a) Error relativo, para $\boldsymbol{\beta}$=-1, γ =2/3

Soluciones solitónicas dispersivas

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

a)



b)

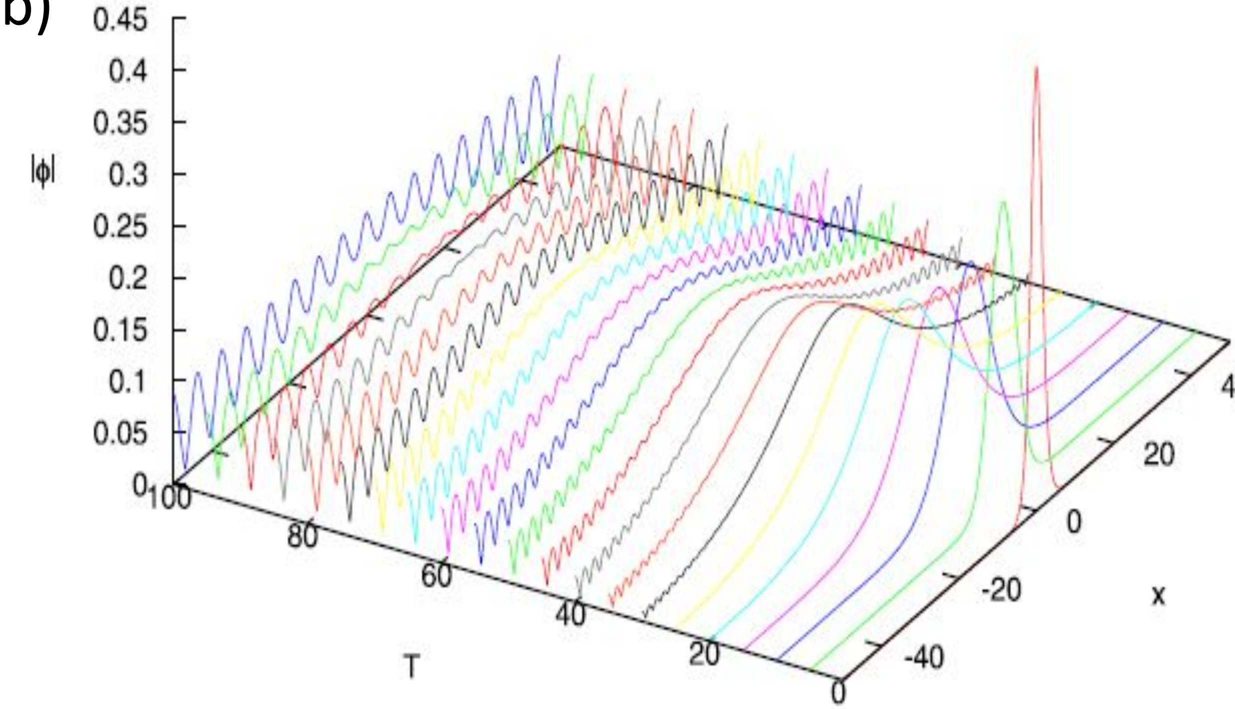
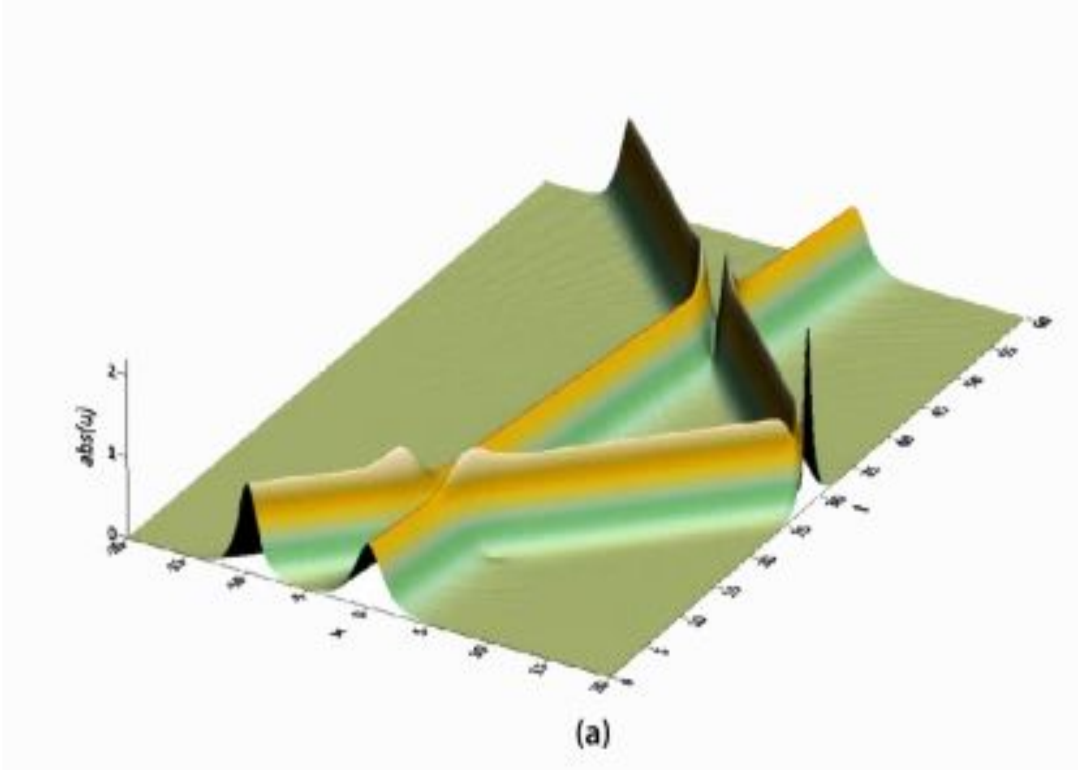


Fig. 4 a) Propagación de la solución teórica y b) De la solución numérica, para $\boldsymbol{\beta}$=1, γ =3

Solución dos solitones colisionando

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

a)



b)

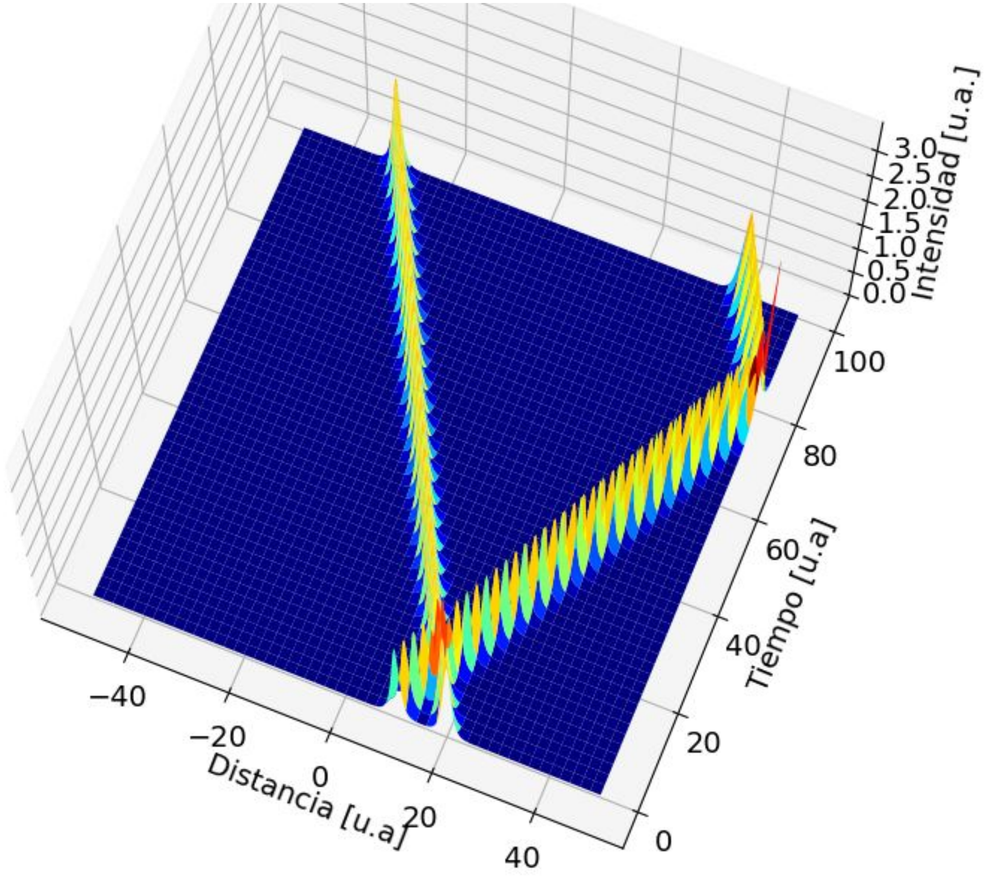


Fig. 5a) Propagación de la solución teórica y b) De la solución numérica, para $\boldsymbol{\beta}$=1, γ =3

[7] Mousa, M. M. apturing of solitons collisions and reflections in nonlinear Schrödinger type equations by a conservative scheme based on MOL. (2021)

Leyes de conservación

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

Físicamente, la ecuación de Schrödinger NL conserva la masa, energía y momento. Podemos evaluar las soluciones numéricas obtenidas al comprobar la conservación de estas cantidades durante la ejecución.

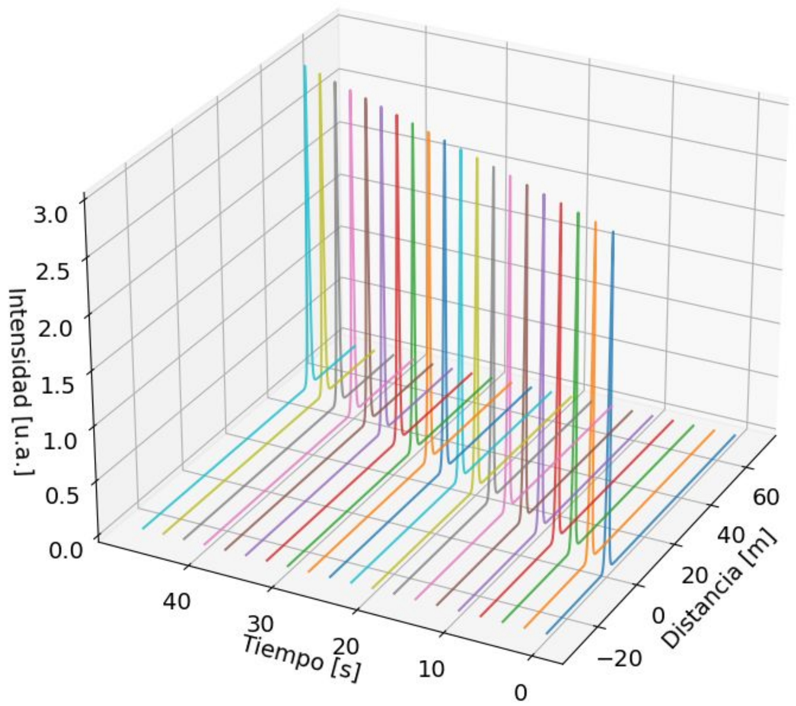
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = constante \Longrightarrow \frac{h}{2}\left[v_1^2 + w_1^2 + 2\sum_{i=2}^{N-1}(v_i^2 + w_i^2) + v_N^2 + w_N^2\right] = constante$$

$$i\int_{-\infty}^{\infty}\left(\bar{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{\partial\bar{\phi}}{\partial x}\phi\right)dx = constante \Longrightarrow \sum_{i=2}^{N-1}\{w_i(v_{i+1} - v_{i-1}) - v_i(w_{i+1} - w_{i-1})\} = constante$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\beta}{2}\left|\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|^2 + \frac{\gamma}{2}|\phi|^4\right]dx = constante \Longrightarrow \begin{array}{l} \frac{\beta}{8h}\sum_{i=2}^{N-1}\left[(v_{i+1} - v_{i-1})^2 + (w_{i+1} - w_{i-1})^2\right] \\ + \frac{\gamma h}{4}\left\{(v_1^2 + w_1^2)^2 + 2\sum_{i=2}^{N-1}(v_i^2 + w_i^2)^2 + (v_N^2 + w_N^2)^2\right\} \end{array} = constante$$

Leyes de conservación

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA



Tiempo	Masa	Momentum	Energía
1	4.2426	-8.4747	0.695
5	4.2426	-8.4746	0.69492
10	4.2426	-8.4747	0.69499
15	4.2426	-8.4747	0.69498
20	4.2426	-8.4747	0.69497
25	4.2426	-8.4747	0.69496
30	4.2426	-8.4746	0.69494
35	4.2426	-8.4747	0.69495
40	4.2426	-8.4746	0.69495
45	4.2426	-8.4746	0.69495
50	4.2426	-8.4746	0.69496

Bibliografía:

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

[1] Venck, S., St-Hilaire, F., Brilland, L., Ghosh, A. N., Chahal, R., Caillaud, C., ... & Sylvestre, T. (2020). 2–10 µm Mid-Infrared Fiber-Based Supercontinuum Laser Source: Experiment and Simulation. Laser & Photonics Reviews, 14(6), 2000011.

[2]Gherman, T., & Romanini, D. (2002). Mode–locked cavity–enhanced absorption spectroscopy. Optics Express, 10(19), 1033-1042.

[3] Lasers in Medicine. SPIE. Recuperado el 31/05/2023 de https://spie.org/news/spie-professional-magazine-archive/2011-january/lasers-in-medicine?SSO=1

[4] Agrawal, G. P. (2000). Nonlinear fiber optics. In Nonlinear Science at the Dawn of the 21st Century (pp. 195-211). Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.

[5]Alanazi, A. A., Alamri, S. Z., Shafie, S., & Binti Mohd Puzi, S. (2021). Solving nonlinear Schrodinger equation using stable implicit finite difference method in single-mode optical fibers. Mathematical Methods in the Applied Sciences, 44(17), 12453-12478.

Bibliografía:

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA

[6] Ismail, M. S., & Alamri, S. Z. (2004). Highly accurate finite difference method for coupled nonlinear Schrödinger equation. International Journal of Computer Mathematics, 81(3), 333-351.

[7] Burden, R. L., Faires, J. D., & Burden, A. M. (2015). Numerical analysis. Cengage learning.

[8] Mousa, M. M., Agarwal, P., Alsharari, F. et al. Capturing of solitons collisions and reflections in nonlinear Schrödinger type equations by a conservative scheme based on MOL. Adv Differ Equ 2021, 346 (2021). https://doi.org/10.1186/s13662-021-03505-7

UNIVERSIDAD
DE ANTIOQUIA