

Cálculo de estados fundamentales para una ecuación de evolución proveniente de modelos matemáticos para semiconductores.

Néstor Biedma^{1 2} Mariano De Leo³

¹ Universidad del Centro de la Provincia de Buenos Aires - Facultad de Ciencias Exactas

² Universidad Nacional del Comahue

³ Universidad Nacional de General Sarmiento - Instituto de Ciencias

UMA
Bahía Blanca 2016

- 1 Un poco de contexto
 - El modelo cuántico
 - Problema Previo: *Evolucionador*
 - Problema Actual: *Optimizador*
- 2 Diseño de Algoritmos: Métodos de descomposición temporal
 - Generalidades
 - Obtención flujos parciales exactos
 - subrutinas
- 3 Diseño de Algoritmos: Flujos parciales aproximados

Modelo para movimiento de cargas en *nanohilo* cuya longitud es mucho mayor que la región ocupada por *impurezas*

Modelo para movimiento de cargas en *nanohilo* cuya longitud es mucho mayor que la región ocupada por *impurezas*

$$i u_t(x, t) = -u_{xx}(x, t) + |x|u(x, t) + V_\infty \cdot u(x, t), \quad t > 0, x \in \mathbb{R}, \quad (1.1)$$

Modelo para movimiento de cargas en *nanohilo* cuya longitud es mucho mayor que la región ocupada por *impurezas*

$$iu_t(x, t) = -u_{xx}(x, t) + |x|u(x, t) + V_\infty \cdot u(x, t), \quad t > 0, x \in \mathbb{R}, \quad (1.1)$$

donde

$$V_\infty(x) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (|x - y| - |x|) \left(\underbrace{\mathcal{D}(y)}_{\text{impurezas}} - |u(y, t)|^2 \right) dy$$

Dadas:

Dadas:

- impurezas o perfil de dopaje \mathcal{D}

Dadas:

- impurezas o perfil de dopaje \mathcal{D}
- dato inicial u_0 ,

Dadas:

- impurezas o perfil de dopaje \mathcal{D}
- dato inicial u_0 ,
- tiempo de vuelo $t > 0$

Hallar:

Dadas:

- impurezas o perfil de dopaje \mathcal{D}
- dato inicial u_0 ,
- tiempo de vuelo $t > 0$

Hallar:

$u(x, t)$ la solución de (1.1).

- El perfil de dopaje \mathcal{D} : positivo, regular,

- El perfil de dopaje \mathcal{D} : positivo, regular,
- $u_0 \in \mathcal{H}$, espacio de trabajo,

$$\mathcal{H} = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) : \int_{\mathbb{R}} \left(\underbrace{|x||\phi(x)|^2}_{\text{decaimiento}} + \underbrace{|\phi_x|^2}_{\text{regularidad}} \right) dx < \infty \right\}$$

- El perfil de dopaje \mathcal{D} : positivo, regular,
- $u_0 \in \mathcal{H}$, espacio de trabajo,

$$\mathcal{H} = \left\{ \phi \in L^2(\mathbb{R}) : \int_{\mathbb{R}} \left(\underbrace{|x||\phi(x)|^2}_{\text{decaimiento}} + \underbrace{|\phi_x|^2}_{\text{regularidad}} \right) dx < \infty \right\}$$

- Balance de cargas: $\int_{\mathbb{R}} \mathcal{D}(y) - |u_0(y)|^2 dy = 2$
ajusta el coeficiente que multiplica a $|x|$ para que valga 1.

- El problema está bien planteado.

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.
- Hay dependencia continua en perfil de dopaje y en dato inicial.

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.
- Hay dependencia continua en perfil de dopaje y en dato inicial.
- La carga se conserva: $\|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$ es constante.

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.
- Hay dependencia continua en perfil de dopaje y en dato inicial.
- La carga se conserva: $\|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$ es constante.
- La energía se conserva: $H(u(t)) = H(u_0)$, donde

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.
- Hay dependencia continua en perfil de dopaje y en dato inicial.
- La carga se conserva: $\|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$ es constante.
- La energía se conserva: $H(u(t)) = H(u_0)$, donde

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \langle \phi_x; \phi_x \rangle + \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{|x|}{2} * \mathcal{D} \right) \phi; \phi \right\rangle - \frac{1}{4} \left\langle \left(\frac{|x|}{2} * |\phi|^2 \right) \phi; \phi \right\rangle$$

- El problema está bien planteado.
- Existe única solución, definida para todo tiempo.
- Hay dependencia continua en perfil de dopaje y en dato inicial.
- La carga se conserva: $\|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$ es constante.
- La energía se conserva: $H(u(t)) = H(u_0)$, donde

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \langle \phi_x; \phi_x \rangle + \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{|x|}{2} * \mathcal{D} \right) \phi; \phi \right\rangle - \frac{1}{4} \left\langle \left(\frac{|x|}{2} * |\phi|^2 \right) \phi; \phi \right\rangle$$

- La energía admite mínimos.

Por analogía con evoluciones en pozos de potencial:

Por analogía con evoluciones en pozos de potencial:

- La carga $|u(x, t)|^2$ quede localizada.

Por analogía con evoluciones en pozos de potencial:

- La carga $|u(x, t)|^2$ quede localizada.
- El centro de masa o primer momento $CM(t) = \int x |u(x, t)|^2 dx$ oscile.

Por analogía con evoluciones en pozos de potencial:

- La carga $|u(x, t)|^2$ quede localizada.
- El centro de masa o primer momento $CM(t) = \int x |u(x, t)|^2 dx$ oscile.
- El perfil \mathcal{D} juegue algún rol en las oscilaciones.

Logramos

Con el diseño e implementación de un algoritmo Híbrido Simbólico-Numérico usando el CAS Mathematica Versión 10.4, denominado *Evolucionador*, obtuvimos:

Logramos

Con el diseño e implementación de un algoritmo Híbrido Simbólico-Numérico usando el CAS Mathematica Versión 10.4, denominado *Evolucionador*, obtuvimos:

(Loading Evol1.avi)

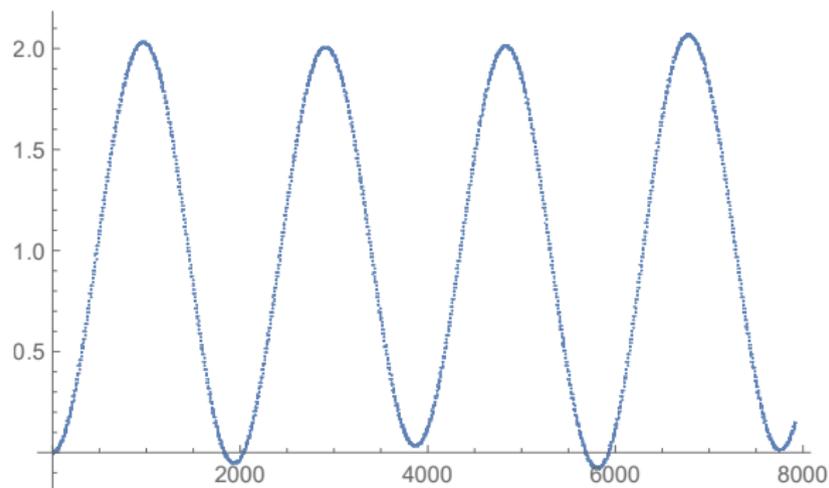


Figure: Oscilaciones del centro de masa

Observemos que:

- el centro de masa oscila alrededor del centro de masa del perfil de dopaje.

Observemos que:

- el centro de masa oscila alrededor del centro de masa del perfil de dopaje.
- de la resolución de éste problema *heredamos* estrategias para el cálculo de los distintos operadores, además de nodos y pesos para la representación y cálculos de integrales de funciones en el espacio indicado.

Problema Actual:

Dado:

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Hallar:

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Hallar:

$$\phi_* \in \mathcal{H} :$$

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Hallar:

$$\phi_* \in \mathcal{H} : \|\phi_*\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$$

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Hallar:

$$\phi_* \in \mathcal{H} : \|\phi_*\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1 \text{ y } H(\phi_*) \leq H(\phi),$$

Problema Actual:

Dado:

El perfil de dopaje \mathcal{D} .

Hallar:

$$\phi_* \in \mathcal{H} : \|\phi_*\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1 \text{ y } H(\phi_*) \leq H(\phi), \text{ con } \|\phi\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$$

- Existen mínimos para la energía, llamados *Estados Fundamentales*.

- Existen mínimos para la energía, llamados *Estados Fundamentales*.
- Los mínimos están localizados alrededor del centro de masa del perfil de dopaje.

- Existen mínimos para la energía, llamados *Estados Fundamentales*.
- Los mínimos están localizados alrededor del centro de masa del perfil de dopaje.
- Los mínimos son positivos y simétricos alrededor del centro de masa de \mathcal{D} .

- Existen mínimos para la energía, llamados *Estados Fundamentales*.
- Los mínimos están localizados alrededor del centro de masa del perfil de dopaje.
- Los mínimos son positivos y simétricos alrededor del centro de masa de \mathcal{D} .
- Los mínimos son funciones suaves.

El campo $-\nabla H$ apunta hacia donde H decrece.

El campo $-\nabla H$ apunta hacia donde H decrece. Proyectando $-\nabla H$ sobre la esfera de radio 1 convertimos el problema de optimización en un problema de evolución sobre la esfera,

El campo $-\nabla H$ apunta hacia donde H decrece. Proyectando $-\nabla H$ sobre la esfera de radio 1 convertimos el problema de optimización en un problema de evolución sobre la esfera, con mínimos de H como atractores:

El campo $-\nabla H$ apunta hacia donde H decrece. Proyectando $-\nabla H$ sobre la esfera de radio 1 convertimos el problema de optimización en un problema de evolución sobre la esfera, con mínimos de H como atractores:

$$u_t = -\nabla H(u) + \langle \nabla H(u); u \rangle u$$

Obtuvimos

Resultados de experimentos con *Optimizador*.

Obtuvimos

Resultados de experimentos con *Optimizador*.

(Loading ObtencionGS1.avi)

Resultados cambiando la distribución inicial

(Loading ObtencionGS3.avi)

Resultados cambiando la distribución inicial y el perfil de dopaje

(Loading ObtencionGS2.avi)

Obtuvimos

Si colocamos los resultados del programa *Optimizador* en el programa *Evolucionador*

(Loading EvolGS1.avi)

Observemos que:

- Para \mathcal{D} fijo,

Observemos que:

- Para \mathcal{D} fijo, el estado fundamental es independiente de la distribución inicial.

Observemos que:

- Para \mathcal{D} fijo, el estado fundamental es independiente de la distribución inicial.
- La distribución es simétrica alrededor del centro de masa de \mathcal{D} .

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v)$$

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v) \text{ y } (PB) w_t = B(w)$$

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v) \text{ y } (PB) w_t = B(w)$$

Se requiere que los flujos parciales:

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v) \text{ y } (PB) w_t = B(w)$$

Se requiere que los flujos parciales:

$$\Phi_A(v_0, t)$$

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v) \text{ y } (PB) w_t = B(w)$$

Se requiere que los flujos parciales:

$$\Phi_A(v_0, t) \text{ y } \Phi_B(w_0, t)$$

Métodos de descomposición temporal: Marco general

Son aplicables para obtener numéricamente el flujo $\Phi_{A+B}(u_0, t)$ para:

$$u_t = A(u) + B(u),$$

a partir de los flujos de los problemas parciales:

$$(PA) v_t = A(v) \text{ y } (PB) w_t = B(w)$$

Se requiere que los flujos parciales:

$$\Phi_A(v_0, t) \text{ y } \Phi_B(w_0, t)$$

sean computables.

Strang:

Strang:

Entrada:

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 ,

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle:

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{\text{Str}}(h) = \Phi_A(\Phi_B(\Phi_A(v_0, h/2), h), h/2)$

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{\text{Str}}(h) = \Phi_A(\Phi_B(\Phi_A(v_0, h/2), h), h/2)$

Salida:

Strang:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{\text{Str}}(h) = \Phi_A(\Phi_B(\Phi_A(v_0, h/2), h), h/2)$

Salida: $\Phi_{A+B}(v_0, t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \Phi_{\text{Str}}(\cdots \Phi_{\text{Str}}(h) \cdots)$

Afín de orden 2:

Afín de orden 2:

Entrada:

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 ,

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle:

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{Af2}(h) = \frac{1}{2} (\Phi_A(\Phi_B(v_0, h), h) + \Phi_B(\Phi_A(v_0, h), h))$

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{Af2}(h) = \frac{1}{2} (\Phi_A(\Phi_B(v_0, h), h) + \Phi_B(\Phi_A(v_0, h), h))$

Salida:

Afín de orden 2:

Entrada: Dato inicial v_0 , tiempo final t_f ,

Bucle: $\Phi_{Af2}(h) = \frac{1}{2} (\Phi_A(\Phi_B(v_0, h), h) + \Phi_B(\Phi_A(v_0, h), h))$

Salida: $\Phi_{A+B}(v_0, t) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \Phi_{Af2}(\cdots \Phi_{Af2}(h) \cdots)$

Para abordar el nuevo problema

Para abordar el nuevo problema

- Necesitamos el cálculo del Funcional H , ello requirió subdividirlo en tres problemas, uno lineal (P1) y dos no lineales (P2 y P3)

Para abordar el nuevo problema

- Necesitamos el cálculo del Funcional H , ello requirió subdividirlo en tres problemas, uno lineal (P1) y dos no lineales (P2 y P3)
- Contamos con el operador lineal $A = -L$, donde $L(\phi) = -\phi_{xx} + |x|\phi$ con espectro conocido

Para abordar el nuevo problema

- Necesitamos el cálculo del Funcional H , ello requirió subdividirlo en tres problemas, uno lineal (P1) y dos no lineales (P2 y P3)
- Contamos con el operador lineal $A = -L$, donde $L(\phi) = -\phi_{xx} + |x|\phi$ con espectro conocido es muy similar al problema precedente

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.

Algo de nomenclatura para interpretar algoritmos

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.
- $\omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$, matriz diagonal con ω_{jj} peso asociado a Θ_j .

Algo de nomenclatura para interpretar algoritmos

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.
- $\omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$, matriz diagonal con ω_{jj} peso asociado a Θ_j .
- $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times M}$ $\Phi_{jk} = \phi_{j-1}(\Theta_k)$ donde $\phi_0(x), \dots, \phi_{M-1}(x)$ autofunciones.

Algo de nomenclatura para interpretar algoritmos

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.
- $\omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$, matriz diagonal con ω_{jj} peso asociado a Θ_j .
- $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times M}$ $\Phi_{jk} = \phi_{j-1}(\Theta_k)$ donde $\phi_0(x), \dots, \phi_{M-1}(x)$ autofunciones.
- $\Lambda = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_{M-1})$ matriz diagonal de autovalores.

Algo de nomenclatura para interpretar algoritmos

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.
- $\omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$, matriz diagonal con ω_{jj} peso asociado a Θ_j .
- $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times M}$ $\Phi_{jk} = \phi_{j-1}(\Theta_k)$ donde $\phi_0(x), \dots, \phi_{M-1}(x)$ autofunciones.
- $\Lambda = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_{M-1})$ matriz diagonal de autovalores.
- $\Omega = \text{diag}\left(\frac{\omega_1}{\phi_0(\Theta_1)}, \dots, \frac{\omega_N}{\phi_0(\Theta_N)}\right)$, matriz diagonal auxiliar.

Algo de nomenclatura para interpretar algoritmos

- $\Theta \in \mathbb{R}^N$, $N = 2n$ y $\{\Theta_{n+1}, \dots, \Theta_N\}$ son los nodos.
- $\omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_N)$, matriz diagonal con ω_{jj} peso asociado a Θ_j .
- $\Phi \in \mathbb{R}^{N \times M}$ $\Phi_{jk} = \phi_{j-1}(\Theta_k)$ donde $\phi_0(x), \dots, \phi_{M-1}(x)$ autofunciones.
- $\Lambda = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_{M-1})$ matriz diagonal de autovalores.
- $\Omega = \text{diag}\left(\frac{\omega_1}{\phi_0(\Theta_1)}, \dots, \frac{\omega_N}{\phi_0(\Theta_N)}\right)$, matriz diagonal auxiliar.
- $R \in \mathbb{R}^{N \times M}$ $R_{jk} = \frac{|\Theta_j - \Theta_k| - |\Theta_j|}{2} \Omega_{kk}$

(P1) Flujo lineal:

Implementación de Flujos Parciales

(P1) Flujo lineal:

Entrada: $f \in \mathbb{C}^{M \times 1}$, %dato inicial
 $\delta > 0$ %tamaño del paso

$p = \text{Four}(f)$ % Obtención de los coeficientes de Fourier
 $h = e^{-\delta \Lambda} \cdot p$ % Evolución coef. Fourier a tiempo δ
 $g = \text{InvFour}(h)$ % Síntesis

Salida $\text{EvolP1}(f, \delta) = g$ $\in \mathbb{C}^{M \times 1}$

Implementación de Flujos parciales

(P2) Flujo no lineal:

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

Para computar los coeficientes $c_k \in \mathbb{R}^N$

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

Para computar los coeficientes $c_k \in \mathbb{R}^N$ aprovechamos la matriz R :

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

Para computar los coeficientes $c_k \in \mathbb{R}^N$ aprovechamos la matriz R :

$$c_{k+1} = R \cdot b_k$$

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

Para computar los coeficientes $c_k \in \mathbb{R}^N$ aprovechamos la matriz R :

$$c_{k+1} = R \cdot b_k$$

En los experimentos realizados, el desarrollo contempló $k \leq 4$.

Implementación de Flujos parciales

(P2) Flujo no lineal:

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

$$a_0(x) = f_0(x)$$

$$b_0(x) = |a_0(x)|^2$$

$$c_0(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} (b_0(y) - \mathcal{D}(y))$$

$$k+1 \geq 1 \quad a_{k+1}(x) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k c_{k-j}(x) a_j(x)$$

$$b_{k+1}(x) = \sum_{j=0}^{k+1} a_{k+1-j}^*(x) a_j(x)$$

$$c_{k+1}(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{|x-y| - |x|}{2} b_k(y) dy$$

Para computar los coeficientes $c_k \in \mathbb{R}^N$ aprovechamos la matriz R :

$$c_{k+1} = R \cdot b_k$$

En los experimentos realizados, el desarrollo contempló $k \leq 4$.

Llamaremos $\text{EvolP2}(\mathcal{D}, f, \delta)$ a la solución numérica de (P2) a tiempo δ .

(P3) Flujo no lineal:

(P3) Flujo no lineal:

Energía

$$\text{Entrada: } f \in \mathbb{C}^{M \times 1},$$

$$\mathcal{D} \in \mathbb{R}^{M \times 1},$$

$$a = \text{Four}(f)^* \cdot \Lambda \cdot \text{Four}(f)$$

$$+ \mathcal{D}^* \cdot R^* \cdot \Omega \cdot |f_0|^2 + \frac{1}{2} |\Theta|^* \cdot \Omega \cdot |f_0|^2$$

$$b = (|f_0|^2)^* \cdot R_0^* \cdot \Omega \cdot |f_0|^2$$

$$\text{Salida: } \text{Energ}(f, \mathcal{D}) = \frac{1}{2} a - \frac{1}{4} b$$

El Sub problema (P3) requiere la resolución de una ecuación ordinaria:

El Sub problema (P3) requiere la resolución de una ecuación ordinaria:

$$\dot{p} = ap^3 - bp^5$$
$$p(0) = 1$$

El Sub problema (P3) requiere la resolución de una ecuación ordinaria:

$$\begin{aligned}\dot{p} &= ap^3 - bp^5 \\ p(0) &= 1\end{aligned}$$

los escalares a, b dependen del dato inicial f_0

El Sub problema (P3) requiere la resolución de una ecuación ordinaria:

$$\begin{aligned}\dot{p} &= ap^3 - bp^5 \\ p(0) &= 1\end{aligned}$$

los escalares a, b dependen del dato inicial f_0

Llamaremos $\text{EvolP3}(\mathcal{D}, f, \delta)$ a la solución de (P3) a tiempo δ .

Implementación de Flujos Parciales

Con un método afín de orden 2 unificamos los problemas (P2) y (P3).

Implementación de Flujos Parciales

Con un método afín de orden 2 unificamos los problemas (P2) y (P3).

```
Entrada:  $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^N$  %Perfil de dopaje  
 $f \in \mathbb{C}^N$  %Dato de entrada  
 $\delta > 0$  %Tamaño del paso  
 $nn \in \mathbb{N}$  %Iteraciones
```

```
aux = f
```

```
Para  $k = 1 : nn$  %Comienzo del bucle
```

```
aux1 = EvolP2 (EvolP3 ( $\mathcal{D}$ , aux,  $\frac{\delta}{nn}$ ),  $\frac{\delta}{nn}$ )
```

```
aux2 = EvolP3 (EvolP2 ( $\mathcal{D}$ , aux,  $\frac{\delta}{nn}$ ),  $\frac{\delta}{nn}$ )
```

```
aux =  $\frac{1}{2}$ (aux1 + aux2) %Método afín
```

```
aux = aux/Norm(aux) %Proyectamos  
%sobre la esfera
```

```
fin %Fin del bucle
```

Salida: $\text{EvolNoLin}(\mathcal{D}, f, \delta, nn) = \text{aux}$

Implementación de Flujos Parciales

Una vez hecho esto, pasamos al método de Strang.

Implementación de Flujos Parciales

Una vez hecho esto, pasamos al método de Strang.

Entrada: $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^N$	%Perfil de dopaje
$f \in \mathbb{C}^N$	%Dato de entrada
$\delta > 0$	%Tamaño del paso
$nn \in \mathbb{N}$	%Cantidad sub-pasos

$aux = \text{EvolP1}(f, \delta/2)$	%1/2 paso con lineal
------------------------------------	----------------------

Mientras Criterio de corte	%A determinar
$aux = \text{EvolP1}(\text{EvolNoLin}(\mathcal{D}, aux, \delta, nn), \delta)$	%Composición flujos
$aux = aux/\text{Norm}(aux)$	%Proy. esfera
fin	%Fin del bucle

$aux = \text{EvolP1}(\text{EvolNoLin}(\mathcal{D}, aux, \delta, nn), \delta/2)$	
$aux = aux/\text{Norm}(aux)$	%Proy. esfera

Salida: $\text{EvolGS}(\mathcal{D}, f, \delta, nn) = aux$

Muchas Gracias