

Métodos numéricos para el cálculo de breathers

Jesús Cuevas Maraver

Grupo de Física No Lineal
Departamento de Física Aplicada I
E.U. Politécnica
Universidad de Sevilla

Imaginática'07. 6 de Marzo de 2007

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton-Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

¿Qué es una red Klein-Gordon? ¿Qué es un breather?

- Una red Klein-Gordon es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que representa un conjunto de osciladores acoplados.

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0$$

¿Qué es una red Klein-Gordon? ¿Qué es un breather?

- Una red Klein-Gordon es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que representa un conjunto de osciladores acoplados.

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0$$

- Un breather es una de las muchas soluciones de este sistema de ecuaciones, caracterizadas por los siguiente parámetros:
 - Es periódica: $u_n(t + T) = u_n(t)$
 - Está localizada: $\lim_{n \rightarrow \pm\infty} |u_n| = 0$

Soluciones periódicas

El espacio de Fourier

- El sistema de EDOs se puede transformar en uno de ecuaciones algebraicas no lineales si sustituimos $u_n(t)$ por su desarrollo en serie de Fourier:

$$u_n(t) = z_n^0 + \sum_{n=1}^{\infty} z_n^k \cos(k\Omega t), \quad \Omega = \frac{2\pi}{T}$$

Soluciones periódicas

El espacio de Fourier

- El sistema de EDOs se puede transformar en uno de ecuaciones algebraicas no lineales si sustituimos $u_n(t)$ por su desarrollo en serie de Fourier:

$$u_n(t) = z_n^0 + \sum_{n=1}^{k_m} z_n^k \cos(k\Omega t), \quad \Omega = \frac{2\pi}{T}$$

- Para poder implementar el sistema de ecuaciones necesitamos un número finito de partículas ($n \leq N$) y truncar la serie de Fourier. Nos quedan entonces $(k_m + 1)N$ ecuaciones.

Soluciones periódicas

La transformada discreta de Fourier

- El sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$F_n^k \equiv -k^2 \Omega^2 z_n^k + V_n'^k + C(2z_n^k - z_{n+1}^k - z_{n-1}^k) = 0$$

Soluciones periódicas

La transformada discreta de Fourier

- El sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$F_n^k \equiv -k^2 \Omega^2 z_n^k + V_n'^k + C(2z_n^k - z_{n+1}^k - z_{n-1}^k) = 0$$

- $V_n'^k$ es la **Transformada Discreta de Fourier** de $V'(u_n(t))$ que se calcula así:

Soluciones periódicas

La transformada discreta de Fourier

- El sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$F_n^k \equiv -k^2 \Omega^2 z_n^k + V_n'^k + C(2z_n^k - z_{n+1}^k - z_{n-1}^k) = 0$$

- $V_n'^k$ es la **Transformada Discreta de Fourier** de $V'(u_n(t))$ que se calcula así:
 - Tomamos $u_n(t)$ en una serie de puntos:

$$u_n(t_j) = z_n^0 + 2 \sum_{k=1}^{k_m} z_n^k \cos(k\Omega t_j), \quad t_j = 2j\pi / [(2k_m + 1)\Omega], \quad j = 0, \dots, k_m$$

Soluciones periódicas

La transformada discreta de Fourier

- El sistema de ecuaciones resultante es el siguiente:

$$F_n^k \equiv -k^2 \Omega^2 z_n^k + V_n'^k + C(2z_n^k - z_{n+1}^k - z_{n-1}^k) = 0$$

- $V_n'^k$ es la **Transformada Discreta de Fourier** de $V'(u_n(t))$ que se calcula así:

- Tomamos $u_n(t)$ en una serie de puntos:

$$u_n(t_j) = z_n^0 + 2 \sum_{k=1}^{k_m} z_n^k \cos(k\Omega t_j), \quad t_j = 2j\pi / [(2k_m + 1)\Omega], \quad j = 0, \dots, k_m$$

- Se obtiene $V_n'^k$ evaluando $V'(u_n(t_j))$:

$$V_n'^k = [V'(u_n(0)) + 2 \sum_{j=1}^{k_m} V'(u_n(t_j)) \cos(k\Omega t_j)] / (2k_m + 1)$$

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton-Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

El oscilador aislado

- Supongamos un oscilador aislado dado por la ecuación diferencial:

$$\ddot{u} + V'(u) = 0$$

El oscilador aislado

- Supongamos un oscilador aislado dado por la ecuación diferencial:

$$\ddot{u} + V'(u) = 0$$

- Buscamos soluciones periódicas de frecuencia Ω .
- Para ello transformamos la EDO en un sistema de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de Fourier:

$$F^k \equiv -k^2 \Omega^2 z^k + V'^k = 0, \quad k = 1 \dots k_m$$

El oscilador aislado

- Supongamos un oscilador aislado dado por la ecuación diferencial:

$$\ddot{u} + V'(u) = 0$$

- Buscamos soluciones periódicas de frecuencia Ω .
- Para ello transformamos la EDO en un sistema de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de Fourier:

$$F^k \equiv -k^2 \Omega^2 z^k + V'^k = 0, \quad k = 1 \dots k_m$$

- El método más sencillo para resolver este sistema de ecuaciones, asegurando una convergencia rápida es el de **Newton-Raphson**.

Resolución de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones de la ecuación $f(x) = 0$.

Resolución de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones de la ecuación $f(x) = 0$.
- Teniendo en cuenta el desarrollo de Taylor alrededor de un punto x_0 ,

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \Rightarrow f(x) = 0 \rightarrow x \approx x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$$

Resolución de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones de la ecuación $f(x) = 0$.
- Teniendo en cuenta el desarrollo de Taylor alrededor de un punto x_0 ,

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \Rightarrow f(x) = 0 \rightarrow x \approx x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$$

- Si partimos de una *semilla* próxima a la solución buscada, en cada iteración nos acercaremos dicha solución aplicando la fórmula:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$$

donde x_n es la solución tras la n-ésima iteración.

Resolución de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones de la ecuación $f(x) = 0$.
- Teniendo en cuenta el desarrollo de Taylor alrededor de un punto x_0 ,

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \Rightarrow f(x) = 0 \rightarrow x \approx x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$$

- Si partimos de una *semilla* próxima a la solución buscada, en cada iteración nos acercaremos dicha solución aplicando la fórmula:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$$

donde x_n es la solución tras la n -ésima iteración.

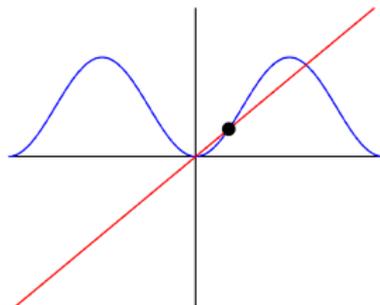
- Las iteraciones continúan hasta que $|f(x_n)| < \epsilon$ o bien $|x_n - x_{n-1}| < \epsilon$.
- Como $f(x)$ puede tener múltiples soluciones, para obtener cada una de ellas hay que usar semillas diferentes.

Resolución de ecuaciones algebraicas

Un ejemplo clarificador

$$f(x) = \frac{x}{2} - \sin^2(x)$$

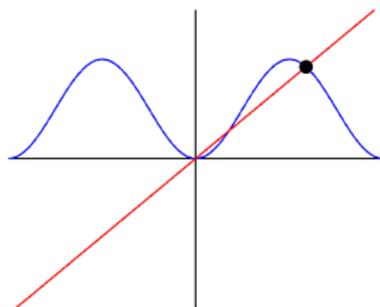
n	x_n	$ x_n - x_{n-1} $	$ f_n $
0	0.5000000000000000		2.015e-002
1	0.55901278243423	5.901e-002	1.764e-003
2	0.55459382975379	4.419e-003	8.594e-006
3	0.55457209136224	2.174e-005	2.105e-010
4	0.55457209082981	5.324e-010	0.000e+000



Resolución de ecuaciones algebraicas

Un ejemplo clarificador

$$f(x) = \frac{x}{2} - \sin^2(x)$$

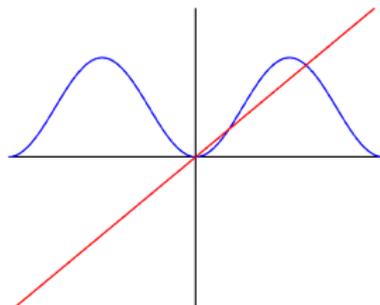


n	x_n	$ x_n - x_{n-1} $	$ f_n $
0	2.0000000000000000		1.732e-001
1	1.86220731561663	1.378e-001	1.365e-002
2	1.84921466172243	1.299e-002	1.417e-004
3	1.84907685211863	1.378e-004	1.612e-008
4	1.84907683643851	1.568e-008	1.110e-016

Resolución de ecuaciones algebraicas

Un ejemplo clarificador

$$f(x) = \frac{x}{2} - \sin^2(x)$$



n	x_n	$ x_n - x_{n-1} $	$ f_n $
0	-20.000000000000000		1.083e+001
1	-11.29920928098181	8.701e+000	6.560e+000
2	-104.18360325340598	9.288e+001	5.233e+001
3	-65.51157929302943	3.867e+001	3.295e+001
4	-176.14960182524385	1.106e+002	8.812e+001
5	-81.05536129021384	9.509e+001	4.087e+001
6	-171.95189492036391	9.090e+001	8.653e+001
7	-346.77217966387849	1.748e+002	1.743e+002
8	-199.08700687426668	1.477e+002	1.004e+002
9	-117.00836469276439	8.208e+001	5.899e+001

!!!No converge!!!

Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones del sistema de ecuaciones $\vec{F}(\vec{x}) = 0$, donde $\vec{F} = \{F^1 \dots F^k\}$ y $\vec{x} = \{x^1 \dots x^k\}$.

Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones del sistema de ecuaciones $\vec{F}(\vec{x}) = 0$, donde $\vec{F} = \{F^1 \dots F^k\}$ y $\vec{x} = \{x^1 \dots x^k\}$.
- La ecuación del método de Newton-Raphson se transforma en:

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - \mathcal{J}^{-1}(\vec{x}_n) \cdot \vec{F}(\vec{x}_n)$$

donde $\mathcal{J}(\vec{x}_n)$ es el Jacobiano evaluado en \vec{x}_n :

$$\mathcal{J}(\vec{x}_n) = \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial F^0}{\partial x^0} & \cdots & \frac{\partial F^0}{\partial x^k} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^k}{\partial x^0} & \cdots & \frac{\partial F^k}{\partial x^k} \end{array} \right)_{\vec{x}=\vec{x}_n}$$

Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas

- Queremos calcular las soluciones del sistema de ecuaciones $\vec{F}(\vec{x}) = 0$, donde $\vec{F} = \{F^1 \dots F^k\}$ y $\vec{x} = \{x^1 \dots x^k\}$.
- La ecuación del método de Newton-Raphson se transforma en:

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - \mathcal{J}^{-1}(\vec{x}_n) \cdot \vec{F}(\vec{x}_n)$$

donde $\mathcal{J}(\vec{x}_n)$ es el Jacobiano evaluado en \vec{x}_n :

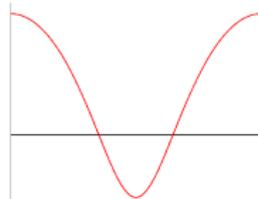
$$\mathcal{J}(\vec{x}_n) = \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial F^0}{\partial x^0} & \cdots & \frac{\partial F^0}{\partial x^k} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^k}{\partial x^0} & \cdots & \frac{\partial F^k}{\partial x^k} \end{array} \right)_{\vec{x}=\vec{x}_n}$$

- $\vec{Y} \equiv \mathcal{J}^{-1}(\vec{x}_n) \cdot \vec{F}(\vec{x}_n)$ se obtiene resolviendo el sistema de ecuaciones lineal $\mathcal{J}(\vec{x}_n) \vec{Y} = \vec{F}(\vec{x}_n)$

Cálculo de la evolución temporal del oscilador aislado

El potencial de Morse

$$V(x) = \frac{1}{2}(\exp(-x) - 1)^2$$



	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	Analítico
	0.3	0.3627	0.3391	0.3409	0.3409	0.3409	0.3409
	0.4	0.3515	0.3337	0.3333	0.3333	0.3333	0.3333
	0.0	-0.0683	-0.0555	-0.0556	-0.0556	-0.0556	-0.0556
	0.0	0.0182	0.0122	0.0123	0.0123	0.0123	0.0123
	0.0	-0.0050	-0.0030	-0.0031	-0.0031	-0.0031	-0.0031
	0.0	0.0012	0.0008	0.0008	0.0008	0.0008	0.0008
	0.0	-0.0003	-0.0002	-0.0002	-0.0002	-0.0002	-0.0002
	0.0	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
	0.0	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000
$\ f\ $	0.1884	0.0289	0.0029	7.53e-006	1.01e-010	1.31e-016	

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton-Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Cálculo de breathers

El teorema de MacKay–Aubry

- El teorema de MacKay–Aubry establece que existen breathers (soluciones periódicas y localizadas) en una red Klein-Gordon

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0$$

siempre que se cumpla que la *condición de no resonancia*:

$$m\Omega \notin [\omega_0, \sqrt{\omega_0 + 4C}], \quad \omega_0 = \sqrt{V''(0)}, \quad m \in \mathbb{N}$$

Cálculo de breathers

El teorema de MacKay–Aubry

- El teorema de MacKay–Aubry establece que existen breathers (soluciones periódicas y localizadas) en una red Klein-Gordon

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0$$

siempre que se cumpla que la *condición de no resonancia*:

$$m\Omega \notin [\omega_0, \sqrt{\omega_0 + 4C}], \quad \omega_0 = \sqrt{V''(0)}, \quad m \in \mathbb{N}$$

- Para obtener un breather se utiliza el método de Newton para el sistema de N osciladores en el espacio de Fourier.
- Se toma como semilla una matriz de ceros excepto en una columna en la que colocamos la solución para el oscilador aislado. El valor de C debe ser pequeño para asegurar la convergencia.

Continuación de las soluciones

- Una vez que se tiene un breather para un valor de $C \neq 0$, se puede *continuar* dicha solución.

Continuación de las soluciones

- Una vez que se tiene un breather para un valor de $C \neq 0$, se puede *continuar* dicha solución.
- El proceso de continuación consiste en calcular la solución para unos parámetros dados (Ω, C) usando como semilla las soluciones existentes para un conjunto de parámetros próximos $(\Omega + \delta\Omega, C + \delta C)$.

Continuación de las soluciones

- Una vez que se tiene un breather para un valor de $C \neq 0$, se puede *continuar* dicha solución.
- El proceso de continuación consiste en calcular la solución para unos parámetros dados (Ω, C) usando como semilla las soluciones existentes para un conjunto de parámetros próximos $(\Omega + \delta\Omega, C + \delta C)$.
- Esta continuación es posible siempre que no exista una *bifurcación*.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.
- El Jacobiano posee $M = [N(k_m + 1)]^2$ elementos:

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.
- El Jacobiano posee $M = [N(k_m + 1)]^2$ elementos:
 - Para el potencial de Morse, $k_m = 17$.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.
- El Jacobiano posee $M = [N(k_m + 1)]^2$ elementos:
 - Para el potencial de Morse, $k_m = 17$.
 - En un sistema de $N = 400$ partículas, $M = 7200^2 \approx 52 \times 10^6$ elementos.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.
- El Jacobiano posee $M = [N(k_m + 1)]^2$ elementos:
 - Para el potencial de Morse, $k_m = 17$.
 - En un sistema de $N = 400$ partículas, $M = 7200^2 \approx 52 \times 10^6$ elementos.
 - En doble precisión, la matriz necesita 396 Mb para su almacenamiento.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- Ya que el Jacobiano puede calcularse analíticamente, el mayor problema computacional en el cálculo de breathers proviene de la inversión del Jacobiano.
- El Jacobiano posee $M = [N(k_m + 1)]^2$ elementos:
 - Para el potencial de Morse, $k_m = 17$.
 - En un sistema de $N = 400$ partículas, $M = 7200^2 \approx 52 \times 10^6$ elementos.
 - En doble precisión, la matriz necesita 396 Mb para su almacenamiento.
- Una solución es utilizar rutinas para matrices esparcidas, que sólo almacenan los elementos diferentes de ceros, junto con las coordenadas de los mismos.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- El Jacobiano tiene una estructura tridiagonal por bloques:

$$\begin{pmatrix} \blacksquare & \square & & & \\ \square & \blacksquare & \square & & \\ & \square & \blacksquare & \square & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

\blacksquare es un bloque no diagonal de dimensión $(k_m + 1) \times (k_m + 1)$ y

\square es un bloque diagonal de esa dimensión.

Continuación de las soluciones

Problemas computacionales

- El Jacobiano tiene una estructura tridiagonal por bloques:

$$\begin{pmatrix} \blacksquare & \square & & & \\ \square & \blacksquare & \square & & \\ & \square & \blacksquare & \square & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

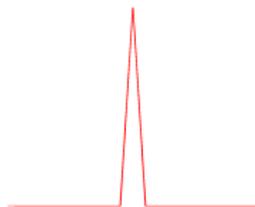
\blacksquare es un bloque no diagonal de dimensión $(k_m + 1) \times (k_m + 1)$ y
 \square es un bloque diagonal de esa dimensión.

- Para la resolución del sistema de ecuaciones se utiliza el paquete LAPACK. Este paquete se llama directamente desde MatLab.

Cálculo y continuación de breathers

El potencial de Morse

$$C = 0$$

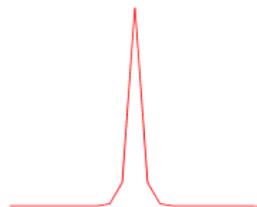


0.0000	0.0000	0.0000	0.3409	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.3333	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	-0.0556	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0123	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	-0.0031	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	-0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	-0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Cálculo y continuación de breathers

El potencial de Morse

$C = 0,05$

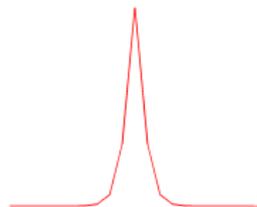


0.0001	0.0017	0.0353	0.5311	0.0353	0.0017	0.0001
0.0007	0.0068	0.0610	0.4477	0.0610	0.0068	0.0007
0.0000	-0.0000	-0.0007	-0.0828	-0.0007	-0.0000	0.0000
-0.0000	0.0000	-0.0002	0.0221	-0.0002	0.0000	-0.0000
0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0067	0.0000	-0.0000	0.0000
-0.0000	0.0000	-0.0000	0.0022	-0.0000	0.0000	-0.0000
0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0007	0.0000	-0.0000	0.0000
-0.0000	0.0000	-0.0000	0.0003	-0.0000	0.0000	-0.0000
0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0001	0.0000	-0.0000	0.0000

Cálculo y continuación de breathers

El potencial de Morse

$$C = 0,1$$



0.0016	0.0179	0.1632	0.7170	0.1632	0.0179	0.0016
0.0074	0.0395	0.1954	0.5514	0.1954	0.0395	0.0074
-0.0000	-0.0001	-0.0205	-0.1082	-0.0205	-0.0001	-0.0000
0.0000	-0.0000	0.0026	0.0324	0.0026	-0.0000	0.0000
-0.0000	0.0000	-0.0004	-0.0111	-0.0004	0.0000	-0.0000
0.0000	-0.0000	0.0000	0.0041	0.0000	-0.0000	0.0000
-0.0000	0.0000	-0.0000	-0.0016	-0.0000	0.0000	-0.0000
0.0000	0.0000	-0.0000	0.0006	-0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0002	0.0000	-0.0000	0.0000

Bifurcaciones

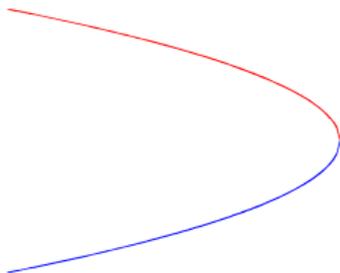
- Un sistema dinámico $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ dependiente del parámetro μ experimenta una bifurcación en $\mu = \mu_0$ si el número de soluciones de $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ es diferente para $\mu < \mu_0$ y $\mu > \mu_0$.

Bifurcaciones

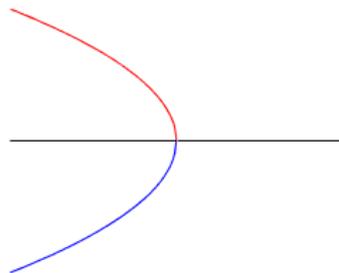
- Un sistema dinámico $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ dependiente del parámetro μ experimenta una bifurcación en $\mu = \mu_0$ si el número de soluciones de $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ es diferente para $\mu < \mu_0$ y $\mu > \mu_0$.
- Suponemos un sistema de una dimensión $f(x, \mu) = 0$.

Bifurcaciones

- Un sistema dinámico $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ dependiente del parámetro μ experimenta una bifurcación en $\mu = \mu_0$ si el número de soluciones de $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ es diferente para $\mu < \mu_0$ y $\mu > \mu_0$.
- Suponemos un sistema de una dimensión $f(x, \mu) = 0$.



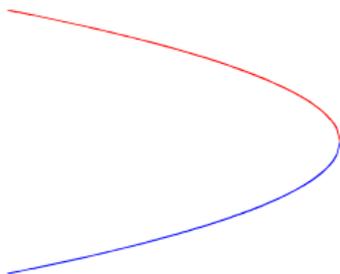
$\rightarrow \mu$
Saddle-Node (Turning point)
 $f(x, \mu) = \mu + x^2$



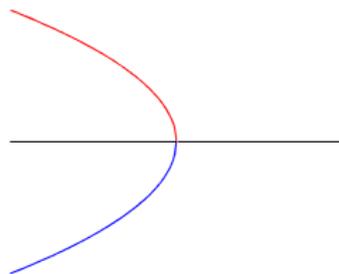
Pitchfork
 $f(x, \mu) = \mu x + x^3$

Bifurcaciones

- Un sistema dinámico $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ dependiente del parámetro μ experimenta una bifurcación en $\mu = \mu_0$ si el número de soluciones de $\vec{f}(\vec{x}, \mu) = 0$ es diferente para $\mu < \mu_0$ y $\mu > \mu_0$.
- Suponemos un sistema de una dimensión $f(x, \mu) = 0$.



$\rightarrow \mu$
Saddle-Node (Turning point)
 $f(x, \mu) = \mu + x^2$



Pitchfork
 $f(x, \mu) = \mu x + x^3$

- Otros tipos de bifurcaciones: Hopf, Neimark.

Bifurcaciones y breathers

- En el caso de un sistema de ecuaciones, puede existir una bifurcación si uno de los autovalores del Jacobiano se anula.

Bifurcaciones y breathers

- En el caso de un sistema de ecuaciones, puede existir una bifurcación si uno de los autovalores del Jacobiano se anula.
- Esta condición es equivalente a que el determinante del Jacobiano sea nulo.

Bifurcaciones y breathers

- En el caso de un sistema de ecuaciones, puede existir una bifurcación si uno de los autovalores del Jacobiano se anula.
- Esta condición es equivalente a que el determinante del Jacobiano sea nulo.
- Numéricamente es menos fiable y más laborioso el cálculo del determinante que la diagonalización del Jacobiano (métodos de Arnoldi para el cálculo de autovalores próximos a cero en ARPACK).

Bifurcaciones y breathers

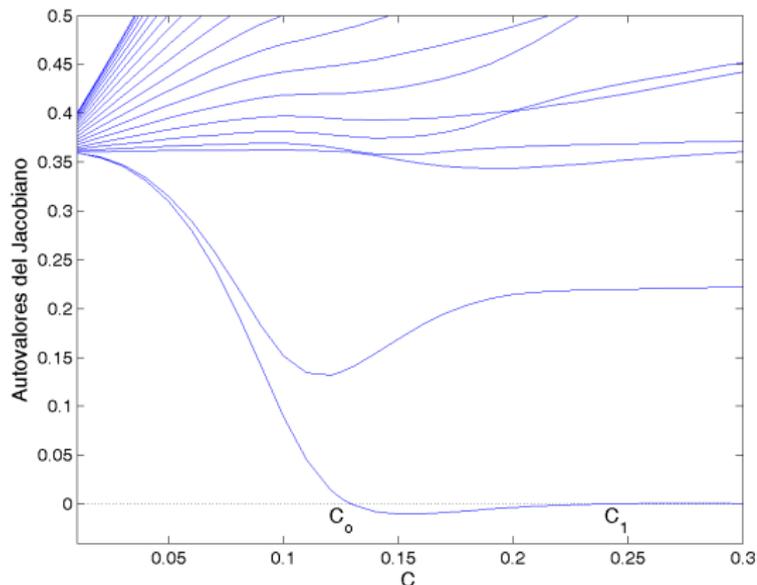
- En el caso de un sistema de ecuaciones, puede existir una bifurcación si uno de los autovalores del Jacobiano se anula.
- Esta condición es equivalente a que el determinante del Jacobiano sea nulo.
- Numéricamente es menos fiable y más laborioso el cálculo del determinante que la diagonalización del Jacobiano (métodos de Arnoldi para el cálculo de autovalores próximos a cero en ARPACK).
- En una bifurcación, el método de Newton-Raphson deja de converger.

Bifurcaciones y breathers

- En el caso de un sistema de ecuaciones, puede existir una bifurcación si uno de los autovalores del Jacobiano se anula.
- Esta condición es equivalente a que el determinante del Jacobiano sea nulo.
- Numéricamente es menos fiable y más laborioso el cálculo del determinante que la diagonalización del Jacobiano (métodos de Arnoldi para el cálculo de autovalores próximos a cero en ARPACK).
- En una bifurcación, el método de Newton-Raphson deja de converger.
- El análisis de bifurcaciones es un tema extremadamente complejo.

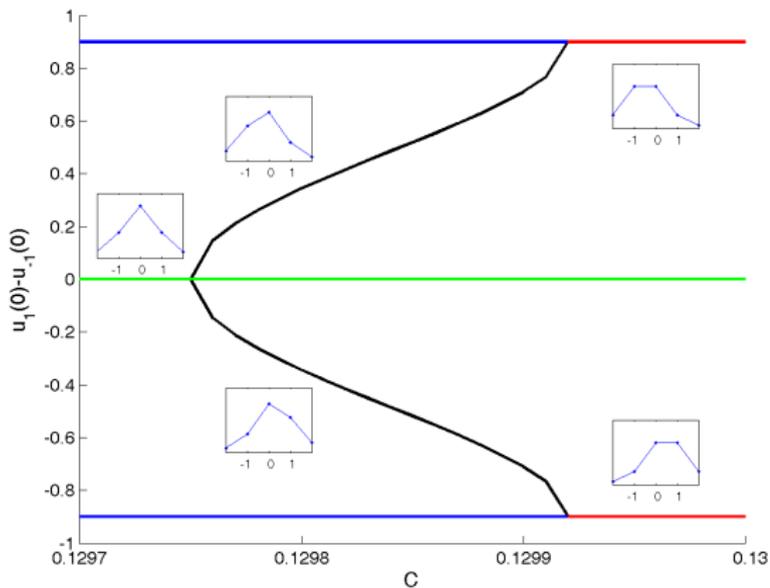
Bifurcaciones y breathers

Ejemplo de bifurcación. Autovalores del Jacobiano



Bifurcaciones y breathers

Ejemplo de bifurcación. Diagrama de bifurcación



Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.
- Sin embargo, existen situaciones en las que es necesario realizar simulaciones, es decir, conocer la evolución temporal de unas condiciones iniciales:

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.
- Sin embargo, existen situaciones en las que es necesario realizar simulaciones, es decir, conocer la evolución temporal de unas condiciones iniciales:
 - Conocer la evolución de una perturbación sobre un breather.

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.
- Sin embargo, existen situaciones en las que es necesario realizar simulaciones, es decir, conocer la evolución temporal de unas condiciones iniciales:
 - Conocer la evolución de una perturbación sobre un breather.
 - Conocer la evolución de una condición inicial diferente del breather en la red.

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.
- Sin embargo, existen situaciones en las que es necesario realizar simulaciones, es decir, conocer la evolución temporal de unas condiciones iniciales:
 - Conocer la evolución de una perturbación sobre un breather.
 - Conocer la evolución de una condición inicial diferente del breather en la red.
 - Estudiar la estabilidad de un breather.

Simulaciones, ¿para qué?

- La evolución temporal de un breather se obtiene de forma inmediata mediante el uso de la serie de Fourier.
- Sin embargo, existen situaciones en las que es necesario realizar simulaciones, es decir, conocer la evolución temporal de unas condiciones iniciales:
 - Conocer la evolución de una perturbación sobre un breather.
 - Conocer la evolución de una condición inicial diferente del breather en la red.
 - Estudiar la estabilidad de un breather.
- Para realizar las simulaciones se utilizan integradores numéricos, siendo el de Runge–Kutta de 4^o orden el más extendido.

El integrador de Runge–Kutta de 4^o orden

Sistema de EDOs de 1er. orden

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

El integrador de Runge–Kutta de 4^o orden

Sistema de EDOs de 1er. orden

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- La condición inicial es $\vec{x}_0 = \vec{x}(t = 0)$.

El integrador de Runge–Kutta de 4^o orden

Sistema de EDOs de 1er. orden

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- La condición inicial es $\vec{x}_0 = \vec{x}(t = 0)$.
- El integrador nos permite conocer la solución para $\vec{x}_{n+1} \equiv \vec{x}(t + h)$, conociendo la solución para $\vec{x}_n \equiv \vec{x}(t)$, mediante la siguiente relación:

El integrador de Runge–Kutta de 4º orden

Sistema de EDOs de 1er. orden

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- La condición inicial es $\vec{x}_0 = \vec{x}(t = 0)$.
- El integrador nos permite conocer la solución para $\vec{x}_{n+1} \equiv \vec{x}(t + h)$, conociendo la solución para $\vec{x}_n \equiv \vec{x}(t)$, mediante la siguiente relación:

$$\vec{k}_1 = \vec{f}(\vec{x}_n)$$

$$\vec{k}_2 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_1/2)$$

$$\vec{k}_3 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_2/2)$$

$$\vec{k}_4 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_3)$$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + h(\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4)/6$$

El integrador de Runge–Kutta de 4º orden

Sistema de EDOs de 1er. orden

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- La condición inicial es $\vec{x}_0 = \vec{x}(t = 0)$.
- El integrador nos permite conocer la solución para $\vec{x}_{n+1} \equiv \vec{x}(t + h)$, conociendo la solución para $\vec{x}_n \equiv \vec{x}(t)$, mediante la siguiente relación:

$$\vec{k}_1 = \vec{f}(\vec{x}_n)$$

$$\vec{k}_2 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_1/2)$$

$$\vec{k}_3 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_2/2)$$

$$\vec{k}_4 = \vec{f}(\vec{x}_n + hk_3)$$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + h(\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4)/6$$

- La precisión es mayor cuando menor sea h .

El integrador de Runge–Kutta de 4^o orden

Evolución de un oscilador aislado

- Suponemos una EDO de segundo orden:

$$\ddot{x} = -V'(x)$$

El integrador de Runge–Kutta de 4^o orden

Evolución de un oscilador aislado

- Suponemos una EDO de segundo orden:

$$\ddot{x} = -V'(x)$$

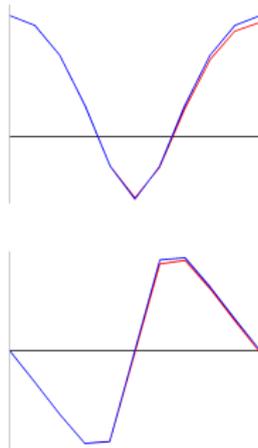
- Esta ecuación puede expresarse como un sistema de dos EDOs:

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -V'(x) \end{cases}$$

El integrador de Runge–Kutta de 4º orden

Ejemplo: Evolución de un oscilador de Morse aislado

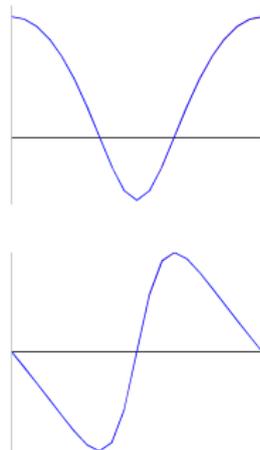
t	Numérico		Analítico	
	$x(t)$	$v(t)$	$x(t)$	$v(t)$
0.0000	0.9163	0.0000	0.9163	0.0000
0.7854	0.8420	-0.1899	0.8420	-0.1899
1.5708	0.6164	-0.3850	0.6164	-0.3851
2.3562	0.2411	-0.5601	0.2412	-0.5604
3.1416	-0.2177	-0.5497	-0.2181	-0.5483
3.9270	-0.4607	-0.0161	-0.4700	-0.0000
4.7124	-0.2260	0.5235	-0.2181	0.5483
5.4978	0.2172	0.5446	0.2412	0.5604
6.2832	0.5825	0.3740	0.6164	0.3851
7.0686	0.7994	0.1785	0.8420	0.1899
7.8540	0.8639	-0.0139	0.9163	-0.0000



El integrador de Runge–Kutta de 4º orden

Ejemplo: Evolución de un oscilador de Morse aislado

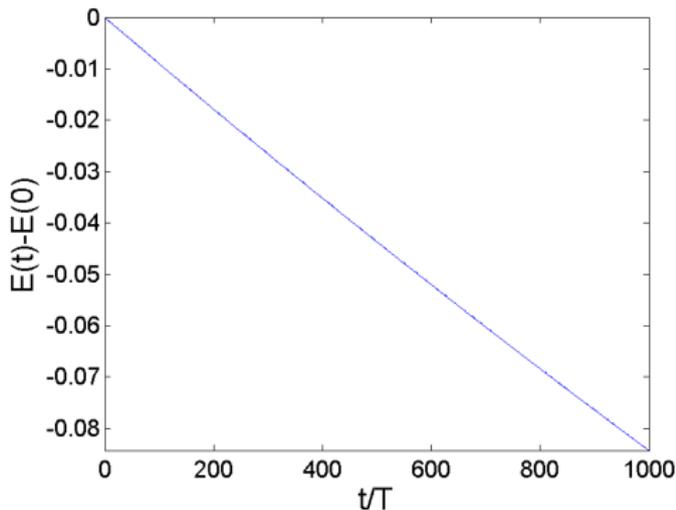
t	Numérico		Analítico	
	$x(t)$	$v(t)$	$x(t)$	$v(t)$
0.0000	0.9163	0.0000	0.9163	0.0000
0.3927	0.8978	-0.0944	0.8978	-0.0944
0.7854	0.8420	-0.1899	0.8420	-0.1899
1.1781	0.7484	-0.2871	0.7484	-0.2871
1.5708	0.6164	-0.3851	0.6164	-0.3851
1.9635	0.4463	-0.4800	0.4463	-0.4800
2.3562	0.2412	-0.5604	0.2412	-0.5604
2.7489	0.0114	-0.5999	0.0114	-0.5999
3.1416	-0.2181	-0.5485	-0.2181	-0.5483
3.5343	-0.3990	-0.3461	-0.3992	-0.3455
3.9270	-0.4698	-0.0013	-0.4700	-0.0000
4.3197	-0.3995	0.3438	-0.3992	0.3455
4.7124	-0.2192	0.5468	-0.2181	0.5483
5.1051	0.0098	0.5990	0.0114	0.5999
5.4978	0.2393	0.5599	0.2412	0.5604
5.8905	0.4443	0.4797	0.4463	0.4800
6.2832	0.6143	0.3849	0.6164	0.3851
6.6759	0.7462	0.2869	0.7484	0.2871
7.0686	0.8397	0.1897	0.8420	0.1899
7.4613	0.8954	0.0942	0.8978	0.0944
7.8540	0.9138	-0.0004	0.9163	-0.0000



El integrador de Runge–Kutta de 4º orden

Breathers y conservación de la energía

- En una red de osciladores, se conserva la energía.
- Uno de los grandes problemas derivados del uso de integradores de Runge-Kutta es la necesidad de valores pequeños de h para que se conserve la energía.



Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

¿Qué es un integrador simpléctico?

- Los integradores simplécticos son modificaciones del método de Runge–Kutta para sistemas en los que se conserva la energía.

¿Qué es un integrador simpléctico?

- Los integradores simplécticos son modificaciones del método de Runge–Kutta para sistemas en los que se conserva la energía.
- Estos integradores tienen una implementación compleja, a menos que se traten con sistemas del tipo

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

¿Qué es un integrador simpléctico?

- Los integradores simplécticos son modificaciones del método de Runge–Kutta para sistemas en los que se conserva la energía.
- Estos integradores tienen una implementación compleja, a menos que se traten con sistemas del tipo

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- El integrador simpléctico de 4^o orden para este tipo de ecuaciones es el llamado de Runge–Kutta–Nyström.

¿Qué es un integrador simpléctico?

- Los integradores simplécticos son modificaciones del método de Runge–Kutta para sistemas en los que se conserva la energía.
- Estos integradores tienen una implementación compleja, a menos que se traten con sistemas del tipo

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- El integrador simpléctico de 4^o orden para este tipo de ecuaciones es el llamado de Runge–Kutta–Nyström.
- En las simulaciones usamos un integrador de 5^o orden llamado método de Calvo.

¿Qué es un integrador simpléctico?

- Los integradores simplécticos son modificaciones del método de Runge–Kutta para sistemas en los que se conserva la energía.
- Estos integradores tienen una implementación compleja, a menos que se traten con sistemas del tipo

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- El integrador simpléctico de 4^o orden para este tipo de ecuaciones es el llamado de Runge–Kutta–Nyström.
- En las simulaciones usamos un integrador de 5^o orden llamado método de Calvo.
- En un método de Runge–Kutta, el número de evaluaciones de \vec{f} es 4, mientras que en el de Calvo es 5. Sin embargo, en este último el valor de h puede ser mayor para que se conserve la energía.

El integrador simpléctico de Calvo

Algoritmo

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

El integrador simpléctico de Calvo

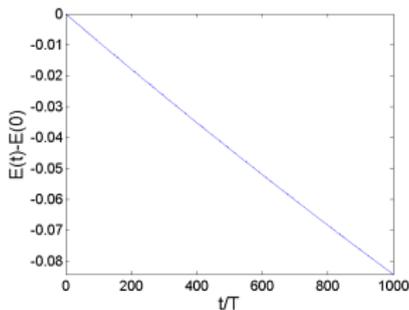
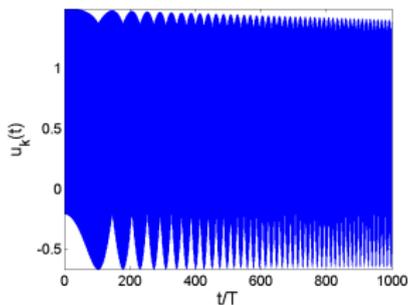
Algoritmo

- Suponemos un sistema de EDOs de la forma:

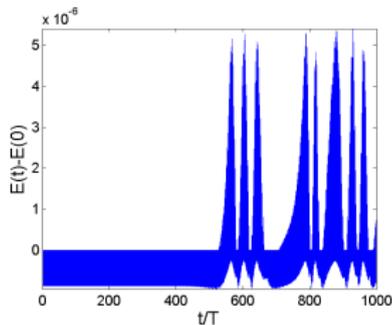
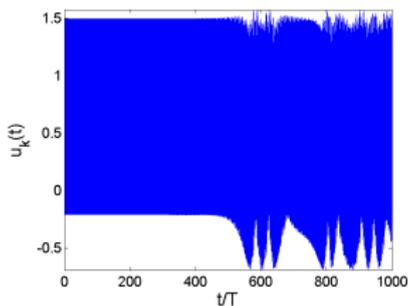
$$\ddot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x})$$

- El integrador relaciona \vec{x}_{n+1} con \vec{x}_n y $\dot{\vec{x}}_{n+1}$ con $\dot{\vec{x}}_n$, mediante el siguiente algoritmo:

Comparación entre Runge-Kutta y Calvo



Runge-Kutta



Calvo

- El paso del integrador es en ambos casos $h = 0,15$ (500 puntos por periodo).

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Análisis de Floquet. La monodromía

- Para el estudio de la estabilidad lineal de breathers se estudia la evolución de una perturbación en un periodo \rightarrow Análisis de Floquet.

Análisis de Floquet. La monodromía

- Para el estudio de la estabilidad lineal de breathers se estudia la evolución de una perturbación en un periodo \rightarrow Análisis de Floquet.
- Para realizar el análisis de Floquet, hay que estudiar el espectro de una matriz llamada *monodromía*.

Análisis de Floquet. La monodromía

- Para el estudio de la estabilidad lineal de breathers se estudia la evolución de una perturbación en un periodo \rightarrow Análisis de Floquet.
- Para realizar el análisis de Floquet, hay que estudiar el espectro de una matriz llamada *monodromía*.
- La monodromía tiene dimensiones $2N \times 2N$ se obtiene realizando $2N$ integraciones (normalmente con el algoritmo de Calvo) de las ecuaciones dinámicas de la perturbación.

Análisis de Floquet. La monodromía

- Para el estudio de la estabilidad lineal de breathers se estudia la evolución de una perturbación en un periodo \rightarrow Análisis de Floquet.
- Para realizar el análisis de Floquet, hay que estudiar el espectro de una matriz llamada *monodromía*.
- La monodromía tiene dimensiones $2N \times 2N$ se obtiene realizando $2N$ integraciones (normalmente con el algoritmo de Calvo) de las ecuaciones dinámicas de la perturbación.
- Un breather es estable si y sólo si todos los autovalores de la monodromía tienen módulo unidad.

Análisis de Floquet. La monodromía

- Para el estudio de la estabilidad lineal de breathers se estudia la evolución de una perturbación en un periodo \rightarrow Análisis de Floquet.
- Para realizar el análisis de Floquet, hay que estudiar el espectro de una matriz llamada *monodromía*.
- La monodromía tiene dimensiones $2N \times 2N$ se obtiene realizando $2N$ integraciones (normalmente con el algoritmo de Calvo) de las ecuaciones dinámicas de la perturbación.
- Un breather es estable si y sólo si todos los autovalores de la monodromía tienen módulo unidad.
- El método de Arnoldi no es efectivo para la determinación de la estabilidad \rightarrow Debe computarse el espectro completo.

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Los métodos de shooting

- Anteriormente, hemos explicado métodos de cálculo de breathers en el espacio de Fourier. Existen métodos de cálculos de breather en el espacio real, que reciben el nombre de métodos de shooting.

Los métodos de shooting

- Anteriormente, hemos explicado métodos de cálculo de breathers en el espacio de Fourier. Existen métodos de cálculos de breather en el espacio real, que reciben el nombre de métodos de shooting.
- Para aplicar este método se aplica el método de Newton a la ecuación $\vec{f} = 0$, con \vec{f} dado por:

$$f = \begin{pmatrix} u_1(T) - u_1(0) \\ \vdots \\ u_N(T) - u_N(0) \\ \dot{u}_1(T) - \dot{u}_1(0) \\ \vdots \\ \dot{u}_N(T) - \dot{u}_N(0) \end{pmatrix}$$

Los métodos de shooting

- Anteriormente, hemos explicado métodos de cálculo de breathers en el espacio de Fourier. Existen métodos de cálculos de breather en el espacio real, que reciben el nombre de métodos de shooting.
- Para aplicar este método se aplica el método de Newton a la ecuación $\vec{f} = 0$, con \vec{f} dado por:

$$f = \begin{pmatrix} u_1(T) - u_1(0) \\ \vdots \\ u_N(T) - u_N(0) \\ \dot{u}_1(T) - \dot{u}_1(0) \\ \vdots \\ \dot{u}_N(T) - \dot{u}_N(0) \end{pmatrix}$$

- $u_n(T)$ y $\dot{u}_n(T)$ se obtienen mediante integración numérica (Calvo). El Jacobiano debe obtenerse numéricamente.

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:
 - Es menos preciso que el método en el espacio de Fourier.

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:
 - Es menos preciso que el método en el espacio de Fourier.
 - No se puede usar un Jacobiano analítico.

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:
 - Es menos preciso que el método en el espacio de Fourier.
 - No se puede usar un Jacobiano analítico.
 - El cálculo del Jacobiano numérico consume mucho tiempo.

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:
 - Es menos preciso que el método en el espacio de Fourier.
 - No se puede usar un Jacobiano analítico.
 - El cálculo del Jacobiano numérico consume mucho tiempo.
- Ventajas:

Los métodos de shooting

- Inconvenientes:
 - Es menos preciso que el método en el espacio de Fourier.
 - No se puede usar un Jacobiano analítico.
 - El cálculo del Jacobiano numérico consume mucho tiempo.
- Ventajas:
 - La dimensión del Jacobiano se reduce a $2N \times 2N$, disminuyendo el tiempo empleado en la inversión del mismo.

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - **Redes FPU y DNLS**
 - Software y Bibliografía

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

- La principal dificultad en este tipo de sistemas radica en el cálculo de breathers.

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

- La principal dificultad en este tipo de sistemas radica en el cálculo de breathers.
 - El Jacobiano tiene siempre un autovalor nulo, por lo que es singular (no invertible).

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

- La principal dificultad en este tipo de sistemas radica en el cálculo de breathers.
 - El Jacobiano tiene siempre un autovalor nulo, por lo que es singular (no invertible).
 - La solución a este problema es la utilización de la técnica de *Descomposición de Valores Singulares* (Algoritmo de Moore-Penrose incluido en LAPACK).

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

- La principal dificultad en este tipo de sistemas radica en el cálculo de breathers.
 - El Jacobiano tiene siempre un autovalor nulo, por lo que es singular (no invertible).
 - La solución a este problema es la utilización de la técnica de *Descomposición de Valores Singulares* (Algoritmo de Moore-Penrose incluido en LAPACK).
 - Esta técnica hace aún más costosa (aunque posible) la inversión del Jacobiano en el método de Newton.

Redes de Fermi–Pasta–Ulam

- Una red Fermi–Pasta–Ulam se diferencia de la de Klein–Gordon en que $V(u) = 0$ y las fuerzas de interacción son anarmónicas.

$$\ddot{u}_n + C[W'(u_n - u_{n+1}) - W'(u_{n-1} - u_n)] = 0$$

- La principal dificultad en este tipo de sistemas radica en el cálculo de breathers.
 - El Jacobiano tiene siempre un autovalor nulo, por lo que es singular (no invertible).
 - La solución a este problema es la utilización de la técnica de *Descomposición de Valores Singulares* (Algoritmo de Moore-Penrose incluido en LAPACK).
 - Esta técnica hace aún más costosa (aunque posible) la inversión del Jacobiano en el método de Newton.
- Tanto las simulaciones como el estudio de la estabilidad se hace de la misma forma que en las redes Klein–Gordon.

La ecuación de Schrödinger No Lineal Discreta

- La ecuación DNLS se puede escribir como:

$$i\dot{u}_n + \gamma|u_n|^2u_n + C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0$$

La ecuación de Schrödinger No Lineal Discreta

- La ecuación DNLS se puede escribir como:

$$i\ddot{u}_n + \gamma|u_n|^2 u_n + C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0$$

- El cálculo de breathers (también llamados *solitones discretos* en este contexto) se simplifica extraordinariamente, ya que se puede expresar:

$$u_n(t) = \exp(i\Omega t)\varphi_n$$

- La ecuación resultante para φ_n no tiene dependencia temporal.

La ecuación de Schrödinger No Lineal Discreta

- La ecuación DNLS se puede escribir como:

$$i\ddot{u}_n + \gamma|u_n|^2u_n + C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0$$

- El cálculo de breathers (también llamados *solitones discretos* en este contexto) se simplifica extraordinariamente, ya que se puede expresar:

$$u_n(t) = \exp(i\Omega t)\varphi_n$$

- La ecuación resultante para φ_n no tiene dependencia temporal.
- Como la ecuación DNLS no puede expresarse de la forma $\ddot{x} = \vec{f}(\vec{x})$, no se pueden usarse métodos simplécticos basados en el de Runge–Kutta–Nyström. Debe usarse siempre el integrador de Runge–Kutta.

La ecuación de Schrödinger No Lineal Discreta

- La ecuación DNLS se puede escribir como:

$$i\ddot{u}_n + \gamma|u_n|^2 u_n + C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0$$

- El cálculo de breathers (también llamados *solitones discretos* en este contexto) se simplifica extraordinariamente, ya que se puede expresar:

$$u_n(t) = \exp(i\Omega t)\varphi_n$$

- La ecuación resultante para φ_n no tiene dependencia temporal.
- Como la ecuación DNLS no puede expresarse de la forma $\ddot{x} = \vec{f}(\vec{x})$, no se pueden usarse métodos simplécticos basados en el de Runge–Kutta–Nyström. Debe usarse siempre el integrador de Runge–Kutta.
- Para el cálculo de la estabilidad no es necesario realizar análisis de Floquet, por lo que sólo hay que diagonalizar una matriz.

Esquema

- 1 Cálculo de breathers en redes Klein-Gordon
 - Redes Klein-Gordon y breathers
 - El método de Newton–Raphson
 - Continuación de soluciones. Bifurcaciones
- 2 Simulaciones en redes Klein-Gordon
 - El método de Runge-Kutta
 - Integradores simplécticos
- 3 Algunas consideraciones finales
 - Estabilidad de breathers
 - Métodos alternativos para el cálculo de breathers
 - Redes FPU y DNLS
 - Software y Bibliografía

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.
- Las simulaciones es recomendable realizarlas en Fortran 90.

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.
- Las simulaciones es recomendable realizarlas en Fortran 90.
- En consecuencia:

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.
- Las simulaciones es recomendable realizarlas en Fortran 90.
- En consecuencia:
 - Se utiliza MatLab para el cálculo de breathers.

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.
- Las simulaciones es recomendable realizarlas en Fortran 90.
- En consecuencia:
 - Se utiliza MatLab para el cálculo de breathers.
 - Se utiliza Fortran para realizar simulaciones y estudiar la estabilidad en redes Klein-Gordon y FPU.

Software recomendado

- Para realizar cálculos matriciales se recomienda el uso de MatLab.
- Las simulaciones es recomendable realizarlas en Fortran 90.
- En consecuencia:
 - Se utiliza MatLab para el cálculo de breathers.
 - Se utiliza Fortran para realizar simulaciones y estudiar la estabilidad en redes Klein-Gordon y FPU.
- Para realizar esta presentación se ha usado el paquete beamer de L^AT_EX.

Bibliografía

-  W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling y B.P. Flannery.
Numerical Recipes in FORTRAN / C.
Cambridge University Press, 1992.
-  J.M. Sanz Serna y M.P. Calvo.
Numerical Hamiltonian problems.
Chapman and Hall, 1994.
-  J. Cuevas Maraver.
Localización y transferencia de energía en redes anarmónicas no homogéneas.
Tesis Doctoral. Universidad de Sevilla, 2002.
<http://www.grupo.us.es/gfnl/thesis>