Lección n°1: Introducción a la función paisaje

Septiembre 2022

En este curso, estudiaremos ciertas propiedades de las funciones propias, solución fundamental, función de Green, y soluciones de Poisson, del operador diferencial lineal de segundo orden

$$-\Delta + V := -\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + V,$$

en dominios en el espacio Euclideano $\mathbb{R}^n$, $n \geq 1$. El operador $-\Delta + V$ se lo conoce como el *operador de Schrödinger* (estacionario), y su estudio es central en la física matemática (más precisamente, en la mecánica cuántica, ya que permite describir la moción de partículas subatómicas). La función real V se la denomina como el *potencial eléctrico*.

Nuestro objetivo principal en el curso es llegar a tener un entendimiento básico sobre el comportamiento de localización de funciones propias y de la solución fundamental del operador de Schrödinger con potenciales V sigulares y positivos, mediante técnicas de análisis armónico, análisis funcional y ecuaciones en derivadas parciales. Especialmente nos interesa comprender propiedades de la función paisaje de M. Filoche y S. Mayboroda [FM12], una relativamente nueva y rápidamente famosa herramienta en este campo. Aunque muchos de nuestros teoremas serán aplicables para potenciales V aleatorios, se tiene que enfatizar que éste no es un curso sobre operadores de Schrödinger aleatorios, y no estudiamos las técnicas relacionadas a la probabilidad.

Enfatizamos las ideas principales e intuitivas para las demostraciones de los resultados, y no buscamos en este curso corto el máximo rigor o la máxima generalidad en las demostraciones o en los enunciados. Por eso, por ejemplo, genéricamente supondremos que nuestros dominios son suaves, y que V es suave, a pesar de que estas suposiciones son subóptimas.

Como prerequisitos del curso es suficiente tener conocimiento general (pero riguroso) de análisis real, análisis funcional, análisis armónico, y ecuaciones en derivadas parciales.

En esta lección, discutiremos

- Comportamiento de funciones propias del operador de Schrödinger.
- El rol del potencial V.
- Localización de Anderson (una muy breve descripción).
- Introducción a la función paisaje y resultados numéricos.
- Conteo de valores propios.
- Principios de incertidumbre para el operador de Schrödinger.

1. Comportamiento de funciones propias

El operador $-\Delta$ es llamado el *Laplaciano*. Sea Ω un dominio en $\mathbb{R}^n$, $n \geq 1$, y $V : \Omega \to \mathbb{R}$, $V \geq 0$ en Ω. Denotamos

$$L := -\Delta + V.$$

Así como las matrices en el algebra lineal, los operadores diferenciales como $-\Delta$ o L pueden tener valores propios y funciones propias,

$$-\Delta\psi = E\psi, \qquad o \qquad L\psi = E\psi,$$

pero los valores propios y las funciones propias dependen tanto del espacio de Hilbert en que vive el dominio del operador como de la condición sobre los valores en la frontera $\partial\Omega$. Para nosotros, el espacio de Hilbert siempre será $L^2(\Omega)$, pero las condiciones en la frontera pueden variar. Por ejemplo, la condición 0 de Dirichlet es $\psi = 0$ en $\partial\Omega$; la condición 0 de Neumann es $\partial\psi/\partial n = 0$ en $\partial\Omega$. Hay muchas otras condiciones sobre los valores en la frontera que se pueden considerar, como condiciones periódicas en la frontera, o condiciones mixtas, o de Robin, etc..

El comportamiento de las funciones propias de L es muy sensitivo a las propiedades del potencial V. Es bien conocido, y la lectora probablemente lo ha calculado antes, que las funciones propias del Laplaciano suelen comportarse como ondas que se transmiten libremente, como seno, coseno, y así. Lo mismo se puede decir de las funciones propias de L cuando la acción de V sobre el operador es suficientemente pequeña. Sin embargo, cuando $V \geq 0$ y "grande" (por ejemplo, si V es mayor que una constante positiva sobre todo Ω), entonces las funciones propias empiezan a localizarse. Ésto quiere decir que decaen exponencialmente fuera de alguna región del dominio Ω.

Un ejemplo clarísimo y clásico de ésto es el modelo del pozo cuadrado finito. En este modelo, tenemos que $n = 1$, $\Omega = \mathbb{R}$, $V = 0$ en $[-\ell, \ell]$, y $V = V_0 \equiv$const en $\mathbb{R}\backslash[-\ell, \ell]$. Como estamos en una sola dimensión, realmente tenemos una ecuación diferencial ordinaria, y por métodos clásicos se puede calcular (y motivamos a la lectora que realice este ejercicio) que las funciones propias con valores propios debajo de V_0 se comportarán como ondas libres dentro de $[-L, L]$, y tendrán decaimiento exponencial fuera de $[-L, L]$.

2. Localización de Anderson

Hacer los cálculos de los valores propios y las funciones propias, como en el modelo del pozo cuadrado finito, rápidamente se complica cuando V es cualquier función no negativa sobre el dominio. Fascinantemente, cuando V es un potencial aleatorio, (por ejemplo, que fluctúa entre 0 y 1 aleatoriamente sobre alguna cuadrícula en Ω) se tiene que las funciones propias se localizan en un lugar concreto en Ω, y rápidamente decaen fuera de este sitio (sin llegar a ser idénticamente 0 fuera del sitio). Este fenómeno fue descubierto por el físico Phillip Anderson en la década de los 60's, hecho por el cual ganó el premio Nobel. En las matemáticas, estos resultados vienen siendo estudiados fuertemente desde los 80s, en el área conocida como la teoría de operadores de Schrödinger aleatorios.

Una pregunta natural, es intentar predecir dónde se localizan las funciones propias, dado el potencial V aleatorio. Es en relación a esta cuestión que introducimos la función paisaje.

3. La función paisaje

La función paisaje es simplemente la función u que resuelve la ecuación

$$-\Delta u + Vu = 1, \qquad \text{en } \Omega,$$

con las condiciones sobre los valores en la frontera adecudadas [FM12]. Cuando $V \equiv 0$, la función paisaje resuelve la ecuación $-\Delta u = 1$, y en este caso se la conoce como la *función de torsión* en la literatura. La función paisaje mágicamente "predice" dónde se localizarán las funciones propias, o al menos, eso es lo que vastos resultados numéricos nos han permitido ver en la última década. Por ejemplo, véase los artículos [ADFJM19b, ADFJM19a]. La ubicación de los valores mínimos de la recíproca $1/u$ corresponde muy cercanamente con la ubicación de las regiones en que las primeras funciones propias se localizan. Estos "milagros" numéricos continúan siendo un misterio y todavía resisten una demostración matemática. Entender estos misterios, y aplicarlos a la ciencia, es un objetivo principal de la colaboración WAVE, un actual equipo interdisciplinario entre matemáticos y físicos apoyada por la fundación Simons.

Además de ayudarnos a entender la localización de funciones propias, la función paisaje también nos ayuda a mejorar nuestro conocimiento sobre el conteo de valores propios del operador de Schrödinger.

4. Conteo de valores propios y la ley de Weyl

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un dominio suave y acotado. En este caso, el operador $-\Delta$ (con condición 0 de Dirichlet en la frontera) tiene espectro puramente discreto $\{E_k\}_{k\in\mathbb{N}}$,

$$0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots \le E_k \nearrow +\infty.$$

¿Cómo se comporta la función N que cuenta los valores propios de $-\Delta$? Aquí,

$$N(E) := \#\{E_k : E_k \le E\}, \qquad E \in \mathbb{R}.$$

Esta pregunta es de alto interés en la física matemática. Cuando $E \nearrow +\infty$, la respuesta la da la *ley de Weyl*

$$\lim_{E\to+\infty} \frac{N(E)}{E^{n/2}} = (2\pi)^{-n}|B(0,1)||\Omega|.$$

Para el operador de Schrödinger $L = -\Delta + V$, bajo ciertas condiciones sobre V y Ω se tiene la relación asintótica (cuando $E \to +\infty$)

$$N_L(E) \sim \frac{1}{(2\pi)^n} \int\int_{\{(x,\xi)\in\Omega\times\mathbb{R}^n : |\xi|^2+V(x)<E\}} dx\, d\xi.$$

La ley de Weyl es un resultado famoso en la física matemática, y todavía se continúa estudiando a gran detalle generalizaciones y mejoras de ésta. Sin embargo, fundamentalmente la ley de Weyl es un resultado asintótico. ¿Hay alguna manera, computacionalmente eficiente, que permita aproximar $N(E)$ lejos del régimen asintótico? Aquí resulta una vez más que la función paisaje da resultados numéricos extremadamente interesantes. Si definimos que

$$N_{1/u}(E) \sim \frac{1}{(2\pi)^n} \int\int_{\{(x,\xi)\in\Omega\times\mathbb{R}^n : |\xi|^2+\frac{1}{u(x)}<E\}} dx\, d\xi,$$

entonces resulta que para muchos diferentes potenciales V, sean periódicos o aleatorios, la función $N_{1/u}(E)$ se acerca (numéricamente) muchísimo a N_L, y lo apróxima mucho mejor que la ley asintótica de Weyl. Para las computaciones numéricas en concreto, véase [ADFJM19a].

5. ¿Por qué funciona tan bien la función paisaje?

Muchas cuestiones, especialmente formulaciones y demostraciones rigurosas de los resultados numéricos tan precisos, siguen siendo un misterio, pero ya existen algunos resultados matemáticos en los últimos años que permiten esclarecer la situación y el poder de la función paisaje. Durante este curso estudiaremos estos resultados. Primero, mostraremos ciertos estimados que la función paisaje satisface, y que nos dan una pista de su aplicabilidad.

Proposición 5.1 ([FM12])**.** *Sea ψ una función propia de $L = -\Delta + V$ con valor propio E, y u la función paisaje, tal que $Lu = 1$ en Ω. Entonces*

$$|\psi(x)| \le Eu(x)\|\psi\|_{L^\infty(\Omega)}.$$

Este resultado dice que si ψ tiene un valor absoluto relativamente alto, entonces la función paisaje también debe tener un valor alto. En otras palabras, las regiones donde las funciones propias se localizan son también regiones donde u no puede ser muy pequeño. Para demostrar la proposición, usaremos el *principio maximal*, cuya demostración se lo dejamos a la lectora como ejercicio.

Lema 5.1. *Si $\varphi \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$, $V \ge 0$ en Ω, $V \in C(\Omega)$, $\varphi = 0$ en $\partial\Omega$, y $-\Delta\varphi + V\varphi \ge 0$ dentro de Ω, entonces $\varphi \ge 0$ dentro de Ω.*

Demostración de la Proposición 5.1. Tomamos una demostración muy simple de S. Steinerberger [Ste17].

$$\begin{aligned} |\psi(x)| = |(-\Delta+V)^{-1}(E\psi)(x)| &\le (-\Delta+V)^{-1}(E\|\psi\|_{L^\infty(\Omega)})(x) \\ &\le E\|\psi\|_{L^\infty(\Omega)}(-\Delta+V)^{-1}(1)(x) = E\|\psi\|_{L^\infty(\Omega)}u(x). \end{aligned} \tag{1}$$

□

Ahora vemos otro resultado que será muy útil en las siguientes lecciones.

Proposición 5.2 ([ADFJM19b]). *Sea u la función paisaje con condición Neumann 0 en la frontera. Entonces, para todo $f \in C^\infty(\Omega)$, tenemos que*

$$\int_\Omega |\nabla f|^2 + V f^2 = \int_\Omega u^2 \Big|\nabla\big(\frac{f}{u}\big)\Big|^2 + \frac{1}{u} f^2. \tag{2}$$

Demostración. Como $-\Delta u + Vu = 1$ en Ω y $\partial u/\partial n = 0$ en $\partial\Omega$, usando la forma débil de la ecuación tenemos que

$$\int_\Omega \nabla u \nabla \phi + V u \phi = \int_\Omega \phi, \qquad \text{para todo } \phi \in C^\infty(\Omega).$$

Usamos esta identidad con $\phi = f^2/u$. Usando la regla del producto, es luego un fácil ejercicio concluir la demostración de (2). □

La última proposición nos dice que la energía total del sistema se puede convertir en una energía conjugada, con $1/u$ como *potencial efectivo*. Notemos que del estimado (2) trivialmente tenemos que

$$\int_\Omega \frac{1}{u} f^2 \leq \int_\Omega |\nabla f|^2 + V f^2.$$

Este tipo de estimado, donde estimamos la energía total del sistema por debajo por una energía potencial, lo solemos llamar un *principio de incertidumbre*. En la siguiente lección veremos cómo usar este estimado para demostrar decaimiento exponencial de soluciones asociadas al operador de Schrödinger.

Referencias

[ADFJM19a] D. N. Arnold, G. David, M. Filoche, D. Jerison, and S. Mayboroda. Computing spectra without solving eigenvalue problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 41(1):B69–B92, 2019. 2, 3

[ADFJM19b] D. N. Arnold, G. David, M. Filoche, D. Jerison, and S. Mayboroda. Localization of eigenfunctions via an effective potential. *Comm. Partial Differential Equations*, 44(11):1186–1216, 2019. 2, 4

[FM12] M. Filoche and S. Mayboroda. Universal mechanism for Anderson and weak localization. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 109(37):14761–14766, 2012. 1, 2, 3

[Ste17] S. Steinerberger. Localization of quantum states and landscape functions. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 145(7):2895–2907, 2017. 3