



UNIVERSIDAD DE VALLADOLID
FACULTAD DE CIENCIAS

TRABAJO FIN DE MÁSTER DE MATEMÁTICAS

**Obtención y análisis de condiciones de
frontera transparentes y absorbentes para
la ecuación lineal de Schrödinger**

Alumno: Manuel Manzanares Barraión

Tutores: Nuria Reguera López e Isaías Alonso Mallo

Departamento de Matemática Aplicada

Valladolid, Septiembre de 2024

Índice general

1. Condiciones de frontera transparentes para la ecuación lineal de Schrödinger	3
1.1. Condiciones frontera transparentes continuas	4
1.2. Condiciones de frontera transparentes semidiscretas en tiempo	7
1.3. Condiciones de frontera transparentes semidiscretas en espacio	13
1.4. Condiciones de frontera transparentes totalmente discretas	16
2. Condiciones de frontera absorbentes para la ecuación lineal de Schrödinger	17
2.1. Condiciones frontera absorbentes continuas	17
2.1.1. Obtención de condiciones frontera absorbentes continuas	18
2.1.2. Discretización espacial de la ecuación y de las condiciones de frontera absorbentes continuas	27
2.2. Condiciones frontera absorbentes semidiscretas	38
3. Experimentos Numéricos	49
4. Conclusiones	63
A. Métodos numéricos para resolver un problema de valor inicial de ecuaciones diferenciales ordinarias	65
Bibliografía y Referencias	66

Introducción

La necesidad de resolver numéricamente un problema de valor inicial de ecuaciones en derivadas parciales definido en un dominio no acotado surge en gran variedad de problemas de Matemática Aplicada con interés en distintos campos dentro de la Ciencia y la Tecnología.

En la práctica, para poder resolver numéricamente este tipo de problemas, es necesario restringirse a un subdominio finito y surge entonces la necesidad de proponer unas condiciones de frontera artificiales, dando lugar a un problema de valor inicial y de frontera. La elección de estas condiciones de frontera es crucial, siendo el objetivo que la solución numérica del problema de valor inicial y de frontera sea una buena aproximación de la solución exacta del problema original. Si, por ejemplo, se trata de un problema de evolución en el que la solución viaja con el tiempo, si no se han elegido unas condiciones de frontera adecuadas, cuando la solución llegue a la frontera, se producirán grandes reflejos que nada tienen que ver con la solución del problema original.

El resultado óptimo es, por tanto, cuando la solución del problema de valor inicial y de frontera construido coincide con la restricción de la solución del problema original al subdominio finito elegido. Las condiciones de frontera que proporcionan este resultado óptimo reciben el nombre de condiciones de frontera transparentes. Sin embargo, con frecuencia, las condiciones de frontera transparentes para muchas ecuaciones son no locales. Esto hace que en la práctica el algoritmo final tenga un coste computacional elevado y en ocasiones, puede ser un inconveniente. Resulta entonces interesante poder construir condiciones de frontera locales para las cuales, aunque no sean transparentes, los reflejos que se originen cuando la solución numérica llegue a la frontera sean de tamaño lo menor posible. Este tipo de condiciones de frontera se llaman absorbentes y se construyen como aproximación de las transparentes.

En este trabajo nos vamos a centrar en la ecuación lineal de Schrödinger. En el capítulo 1 construiremos condiciones de frontera transparentes, tanto para el problema continuo como para discretizaciones concretas en tiempo y en espacio de la ecuación. Como éste es uno de los casos en el que las condiciones de frontera transparentes son no locales, en el capítulo 2 construiremos condiciones de frontera absorbentes locales tanto para el problema continuo, como para una discretización espacial de la ecuación mediante diferencias finitas. Por último, en el capítulo 3 se realizarán distintos experimentos numéricos con los que analizaremos tanto la precisión con la que se aproxima la solución en el dominio interior, como el grado de absorción de las distintas condiciones de frontera absorbentes construidas en el capítulo 2.

Capítulo 1

Condiciones de frontera transparentes para la ecuación lineal de Schrödinger

En este trabajo vamos a considerar la ecuación lineal de Schrödinger:

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u + V(x, t)u, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (1.1)$$

donde el potencial satisface que $V(\cdot, t) \in L^\infty(\mathbb{R})$.

La ecuación (1.1) es una de las ecuaciones básicas de la mecánica cuántica y surge en muchas áreas de interés físico y en ingeniería. Ejemplos de ello es el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas [18], el estudio de semiconductores cuánticos [13], también es de utilidad en óptica [26] y en acústica submarina [29].

Nótese que la ecuación (1.1) está definida en un dominio espacial no acotado. Nos gustaría conocer una aproximación de la solución de (1.1), pero para resolver numéricamente el problema, es necesario considerar un subdominio espacial finito $[x_i, x_d]$, de manera que la condición inicial $u_0(x) \subset [x_i, x_d]$. Además es necesario proponer unas condiciones de frontera adecuadas para que la solución del nuevo problema sea lo más parecida posible a la solución del problema original (1.1).

Más precisamente, al integrar el problema

$$\begin{aligned} i\partial_t u &= -\partial_x^2 u + V(x, t)u, & x \in [x_i, x_d], & \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x \in \mathbb{R}, & \\ \text{condiciones de frontera en } & x_i, x_d, & t > 0, & \end{aligned} \quad (1.2)$$

con $u_0 \in L^2(\mathbb{R})$, se obtiene una solución que viaja con el tiempo a través del dominio espacial y llega a la frontera. Si las condiciones de frontera que hemos elegido para x_i y x_d no son adecuadas, se producirán ondas reflejadas que se mueven hacia el interior del dominio y que nada tienen que ver con la solución del problema original (1.1).

Se plantea entonces la pregunta: ¿cómo elegir unas condiciones de frontera adecuadas para que esto no ocurra? Lo ideal es que la solución del problema (1.2) sea igual a la restricción a

$[x_i, x_d]$ de la solución del problema en el dominio no acotado (1.1). Las condiciones de frontera que permiten conseguir este objetivo se llaman condiciones de frontera transparentes.

Nuestro primer objetivo en este trabajo es obtener condiciones de frontera transparentes para la ecuación lineal de Schrödinger (1.1).

Vamos a suponer que el dato inicial es de soporte compacto y que $\text{supp}(u_0) \subset [x_i, x_d]$ y que el potencial dado es constante fuera de este dominio finito, por tanto,

$$V(x, t) = \begin{cases} V_i & \text{si } x \leq x_i, \\ V_d & \text{si } x \geq x_d. \end{cases}$$

Además, estamos interesados en soluciones de la ecuación lineal de Schrödinger que tiendan a cero cuando x tiende a $\pm\infty$. El carácter bien puesto del problema que estamos considerando es estudiado en [10] en el siguiente teorema.

Teorema 1.0.1. Sea $u_0 \in L^2(\mathbb{R})$ y $V \in \mathcal{C}([0, \infty), L^\infty(\mathbb{R}))$. Entonces el sistema

$$\begin{aligned} i\partial_t u &= -\partial_x^2 u + V(x, t)u, & x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \end{aligned} \tag{1.3}$$

tiene una única solución $u \in \mathcal{C}([0, \infty), L^2(\mathbb{R}))$. Además, se satisface la siguiente igualdad

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2, \quad \text{para todo } t \geq 0.$$

A lo largo de este capítulo mostraremos diferentes formas de obtener condiciones frontera transparentes. Partiremos de la derivación clásica para obtener condiciones de frontera transparentes de tipo continuo para el problema de valor inicial. En segundo lugar, imitaremos este procedimiento para la ecuación de Schrödinger discreta en el tiempo, derivamos así condiciones de frontera transparentes temporalmente discretas. En tercer lugar, consideraremos las condiciones de frontera transparentes semidiscretas en espacio y, finalmente, hablaremos de las condiciones frontera transparentes totalmente discretas.

1.1. Condiciones frontera transparentes continuas

Nuestro objetivo es diseñar condiciones de frontera transparentes en x_i y x_d , de tal manera que el problema de valor inicial y de frontera resultante esté bien puesto y que su solución coincida con la solución del problema total restringida al intervalo $[x_i, x_d]$; para ello, se ha supuesto que el dato inicial sea de soporte compacto en el intervalo $[x_i, x_d]$ y que, además, el potencial sea constante fuera de dicho intervalo.

En esta sección, siguiendo [10] y otras referencias clásicas como [11], presentamos una derivación formal de condiciones de frontera transparentes para soluciones suaves (es decir, funciones de clase \mathcal{C}^1). Para ello dividimos el problema de espacio total original en tres subproblemas: el problema interior en el dominio $[x_i, x_d]$ y un problema exterior izquierdo y derecho.

Descomponemos $L^2(\mathbb{R}) = L^2(\Omega) \oplus L^2(\Omega_d \cup \Omega_i)$, donde $\Omega = [x_i, x_d]$, $\Omega_i = (-\infty, x_i]$ y $\Omega_d = [x_d, \infty)$. Por tanto, (1.1) es equivalente al siguiente sistema acoplado

$$\begin{aligned} (i\partial_t + \partial_x^2) v &= V(x, t)v, & (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ \partial_x v(x, t) &= \partial_x w(x, t), & x = x_{i,d}, \quad t > 0, \\ v(x, 0) &= u_0(x), & x \in \Omega, \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} (i\partial_t + \partial_x^2) w &= V_{i,d}w, & (x, t) \in (\Omega_d \cup \Omega_i) \times \mathbb{R}^+, \\ w(x, t) &= v(x, t), & x = x_{i,d}, \quad t > 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x, t) &= 0, & t > 0, \\ w(x, 0) &= 0, & x \in \Omega_d \cup \Omega_i. \end{aligned} \quad (1.5)$$

En la figura que se adjunta a continuación (extraída de [10]) se ilustra la división del dominio espacial \mathbb{R} en problemas interiores y exteriores y cómo realizar dicha resolución.

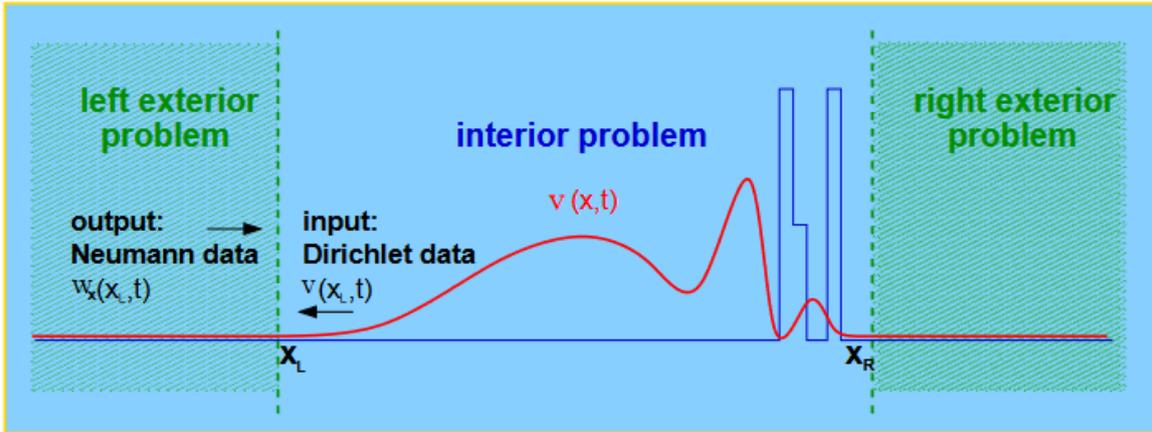


Figura 1.1: Descomposición del dominio de partida e idea básica de la construcción de las condiciones de frontera transparentes.

Dado que el potencial es constante en los problemas exteriores, podemos resolver el problema por el método de Laplace. Recordemos que la transformada de Laplace de una función $f \in L^\infty(0, \infty)$ se define como

$$\mathcal{L}[f(z)](s) = \int_0^\infty f(z)e^{-sz} dz,$$

para $s > 0$. Por simplicidad, utilizaremos como notación para la transformada de Laplace de una función f tanto $\mathcal{L}[f(z)](s)$ como $\hat{f}(s)$.

Aplicamos a continuación la transformación de Laplace de la función w respecto del tiempo t a los problemas exteriores (1.5). Trabajemos, en primer lugar, con el problema exterior derecho, es decir, cuando $x = x_d$ en el dominio $\Omega_d = [x_d, \infty)$. Tomando transformada de Laplace, se obtiene

$$\mathcal{L}[(i\partial_t + \partial_x^2) w] = \mathcal{L}[V_d w]$$

$$\begin{aligned} i\mathcal{L}[\partial_t w] + \mathcal{L}[\partial_x^2 w] &= \mathcal{L}[V_d w] \\ i s \hat{w} + \partial_x^2 \hat{w} &= V_d \hat{w}, \quad x \in \Omega_d. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Para obtener la expresión anterior, se han tenido en cuenta las siguientes propiedades de la transformada de Laplace:

i) La transformada de Laplace es lineal, si $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ y $f, g \in L^\infty(0, \infty)$, entonces

$$\mathcal{L}[\alpha f(z) + \beta g(z)](s) = \alpha \mathcal{L}[f(z)](s) + \beta \mathcal{L}[g(z)](s).$$

ii) La transformada de Laplace de la derivada viene dada como

$$\mathcal{L}\left[\left(\frac{d}{dz} f\right)(z)\right](s) = -f(0) + s\mathcal{L}[f(z)](s). \quad (1.7)$$

Más concretamente, para obtener (1.6), se ha usado la propiedad de linealidad de la transformada de Laplace (propiedad i)) y, también se ha utilizado la propiedad ii) de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}[i\partial_t w](s) = i\mathcal{L}\left[\left(\frac{d}{dt} w\right)(t)\right](s) = i[-w(x, 0) + s\mathcal{L}[w(t)](s)] = i s \hat{w}(x, s),$$

puesto que $w(x, 0) = 0$ en (1.5).

A continuación, se muestra otra propiedad de la transformada de Laplace que nos será útil más adelante:

iii) La transformada del producto de convolución es el producto de las transformadas

$$\mathcal{L}[(f * g)(z)](s) = \mathcal{L}[f(z)](s)\mathcal{L}[g(z)](s),$$

donde recordemos que el producto de convolución al que nos referimos es:

$$(f * g)(z) = \int_0^z f(z - \tau)g(\tau)d\tau.$$

Operando en (1.6), se tiene

$$z\hat{w} - \partial_x^2 \hat{w} = 0,$$

donde se ha usado la notación $z = V_d - is$. Por lo que nos encontramos con una ecuación diferencial de la que es fácil encontrar la solución. Para ello tomamos el polinomio característico asociado a dicha ecuación, que viene determinado por

$$p(y) = -y^2 + z,$$

donde la variable y es la variable del polinomio característico al haber tomado $z = V_d - is$. Por tanto, las raíces del polinomio característico son

$$-y^2 + z = 0 \Rightarrow y^2 = z \Rightarrow y = \pm\sqrt{z}.$$

Luego, la solución general de la ecuación diferencial es

$$\hat{w}(x, s) = A(s)e^{\sqrt{z}x} + B(s)e^{-\sqrt{z}x},$$

y sustituyendo el valor de z en nuestra solución tenemos que

$$\hat{w}(x, s) = A(s)e^{\sqrt{V_d - is}x} + B(s)e^{-\sqrt{V_d - is}x}, \quad \text{para todo } x > x_d.$$

Cabe observar que la raíz cuadrada que tomamos es aquella cuya rama tiene parte real positiva. Para que la solución \hat{w} pertenezca a $L^2(\Omega_d)$, el coeficiente A debe anularse, puesto que

$$\int_{x_d}^{\infty} e^{\sqrt{V_d - is}x} dx = \left[\frac{1}{\sqrt{V_d - is}} e^{\sqrt{V_d - is}x} \right]_{x_d}^{\infty} = \infty.$$

En consecuencia, la solución viene escrita de la forma

$$\hat{w}(x, s) = B(s)e^{-\sqrt{V_d - is}x}, \quad \text{para todo } x > x_d. \quad (1.8)$$

Haciendo uso de (1.5), $w(x, t) = v(x, t)$ para $x = x_d$ y $t > 0$, tenemos que

$$\hat{v}(x_d, s) = \mathcal{L}[v(x_d, t)](s) = \mathcal{L}[w(x_d, t)](s) = B(s)e^{-\sqrt{V_d - is}x_d},$$

luego el factor $B(s)$ viene determinado por

$$B(s) = e^{\sqrt{V_d - is}x_d} \mathcal{L}[v(x_d, t)](s).$$

Entonces, la igualdad (1.8) se reescribe como

$$\hat{w}(x, s) = B(s)e^{-\sqrt{V_d - is}x} = e^{\sqrt{V_d - is}x_d} \mathcal{L}[v(x_d, t)](s) e^{-\sqrt{V_d - is}x} = e^{-\sqrt{V_d - is}(x - x_d)} \mathcal{L}[v(x_d, t)](s).$$

Derivando respecto de la variable espacial, obtenemos que

$$\partial_x \hat{w}(x, s) = -\sqrt{V_d - is} e^{-\sqrt{V_d - is}(x - x_d)} \mathcal{L}[v(x_d, t)](s) = -\sqrt{V_d - is} \hat{w}(x, s)$$

Y tomando $x = x_d$ llegamos a obtener la condición de frontera transparente derecha

$$\boxed{\partial_x \hat{w}(x, s)|_{x=x_d} = -\sqrt{V_d - is} \hat{w}(x_d, s)}. \quad (1.9)$$

Razonando de manera similar, se deduce la condición de frontera transparente continua izquierda

$$\boxed{-\partial_x \hat{w}(x, s)|_{x=x_i} = -\sqrt{V_i - is} \hat{w}(x_i, s)}. \quad (1.10)$$

1.2. Condiciones de frontera transparentes semidiscretas en tiempo

En la sección 1.1 hemos obtenido condiciones de frontera transparentes para el problema continuo, es decir, antes de considerar qué discretización de la ecuación vamos a utilizar, tanto temporal como espacial. Ahora, en esta sección, vamos a considerar primero una discretización temporal de la ecuación lineal de Schrödinger y, para el problema semidiscreto en tiempo, vamos a construir condiciones de frontera transparentes. En concreto, vamos a discretizar en

tiempo el problema (1.2) mediante un método lineal multipaso A -estable con longitud de paso constante. Véase el Apéndice A donde se describen brevemente estos métodos numéricos.

Si discretizamos la ecuación diferencial del problema exterior derecho siguiente

$$i\partial_t w = -\partial_x^2 w + Vw,$$

con potencial V constante, es decir, de la forma

$$V(x, t) = \begin{cases} V_i & \text{si } x \leq x_i, \\ V_d & \text{si } x \geq x_d \end{cases}$$

usando un método lineal multipaso A -estable nos queda

$$\frac{i}{k} \sum_{j=0}^K \alpha_j w^{n-j} = \sum_{j=0}^K \beta_j (-\partial_x^2 + V) w^{n-j}, \quad n \geq K, \quad (1.11)$$

es decir,

$$\begin{aligned} & \frac{i}{k} [\alpha_0 w^n + \alpha_1 w^{n-1} + \dots + \alpha_{K-1} w^{n-K+1} + \alpha_K w^{n-K}] = \\ & = (-\partial_x^2 + V) [\beta_0 w^n + \beta_1 w^{n-1} + \dots + \beta_{K-1} w^{n-K+1} + \beta_K w^{n-K}]. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Al igual que hicimos en el caso continuo, dividimos el problema total original en tres subproblemas: un problema interior y otros dos exteriores (izquierdo y derecho) con sus respectivas soluciones, v^n y w^n , que son, respectivamente, las aproximaciones a $v(x, t_n)$ y $w(x, t_n)$. Consideraremos en primer lugar que estamos trabajando en el problema exterior derecho, es decir, en el intervalo $[x_d, \infty)$, donde el potencial viene dado por $V(x, t) = V_d$. Siguiendo lo analizado en [10], en lugar de aplicar la transformada de Laplace, como hicimos en el caso continuo, aplicaremos la transformada \mathcal{Z} (o \mathcal{Z} -transformada) a la igualdad (1.11). La \mathcal{Z} -transformada de una sucesión (u^n) se define como

$$\mathcal{Z}(u^n) = \hat{u}(z) := \sum_{n=0}^{\infty} u^n z^{-n}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad |z| > R(\mathcal{Z}(u^n)),$$

donde $R(\mathcal{Z}(u^n))$ es el radio de convergencia de la serie de Laurent $\mathcal{Z}(u^n)$.

Si tomamos \mathcal{Z} -transformadas en ambos lados de la igualdad (1.11) obtenemos la ecuación diferencial ordinaria de segundo orden

$$\left(\partial_x^2 + i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right) \hat{w}(z) = 0, \quad x > x_d, \quad (1.13)$$

donde

$$\delta(z) = \frac{\sum_{j=0}^K \alpha_j z^{K-j}}{\sum_{j=0}^K \beta_j z^{K-j}} \quad (1.14)$$

es la función generatriz del integrador en tiempo.

A continuación vamos a deducir nosotros la expresión de $\delta(z)$ para dos integradores temporales concretos: la regla de los trapecios y el método de Euler implícito y vamos a comprobar que la expresión de $\delta(z)$ que nosotros obtenemos coincide con la deducida en (1.13) para el caso general.

Ejemplo 1: Regla del trapecio.

La regla del trapecio es un método numérico de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias (véase Apéndice A). Suponiendo que se quiere resolver la ecuación diferencial $y' = f(t, y)$, la regla del trapecio viene dada por la fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})),$$

donde $k = t_{n+1} - t_n$ es la distancia entre t_n y t_{n+1} . En nuestro caso, la función f tiene la forma $f(t, u) = i(\partial_x^2 - V(x, t))u$, por tanto obtenemos

$$\frac{1}{k} [u^{n+1} - u^n] = \frac{i(\partial_x^2 - V^n(x))u^n}{2} + \frac{i(\partial_x^2 - V^{n+1}(x))u^{n+1}}{2}.$$

Multiplicando a ambos miembros de la igualdad anterior por i tenemos que

$$\frac{i}{k} [u^{n+1} - u^n] = \frac{(-\partial_x^2 + V^n(x))u^n}{2} + \frac{(-\partial_x^2 + V^{n+1}(x))u^{n+1}}{2},$$

Escribimos la ecuación diferencial discretizada de forma completa

$$\begin{aligned} i \frac{u^{n+1} - u^n}{k} &= -\partial_x^2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \frac{V^{n+1}(x)u^{n+1} + V^n(x)u^n}{2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u^n &= 0, \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}, \\ u^0 &= u_0(x), \quad \text{para todo } x \in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{1.15}$$

En primer lugar, consideremos el problema exterior derecho, por tanto, la ecuación (1.15) se traduce en

$$i \frac{w^{n+1} - w^n}{k} = -\partial_x^2 \frac{w^{n+1} + w^n}{2} + \frac{V_d(w^{n+1} + w^n)}{2},$$

donde el potencial es constante, por tanto, $V^n = V^{n+1} = V_d$. Multiplicamos ahora por z^{-n} a ambos lados de la igualdad anterior

$$i \frac{w^{n+1}z^{-n} - w^n z^{-n}}{k} = -\partial_x^2 \frac{w^{n+1}z^{-n} + w^n z^{-n}}{2} + \frac{V_d(w^{n+1}z^{-n} + w^n z^{-n})}{2},$$

si descomponemos $z^{-n} = z^{-(n+1)}z$, obtenemos que la ecuación anterior se reescribe como

$$i \frac{w^{n+1}z^{-(n+1)}z - w^n z^{-n}}{k} = -\partial_x^2 \frac{w^{n+1}z^{-(n+1)}z + w^n z^{-n}}{2} + \frac{V_d(w^{n+1}z^{-(n+1)}z + w^n z^{-n})}{2}$$

Sumamos ahora para todo $n \in \mathbb{N}_0$ y usando la definición de \mathcal{Z} -transformada obtenemos que

$$i \frac{z\hat{w}(z) - \hat{w}(z)}{k} = \frac{(-\partial_x^2 + V_d)}{2} [z\hat{w}(z) + \hat{w}(z)],$$

que se puede reescribir como

$$\hat{w}(z) \frac{i(z-1)}{k} = \frac{(-\partial_x^2 + V_d)(z+1)}{2} \hat{w}(z).$$

Dividiendo en sendos lados de la igualdad por $\frac{z+1}{2}$

$$\hat{w}(z) \frac{i}{k} \frac{2(z-1)}{(z+1)} = (-\partial_x^2 + V_d) \hat{w}(z),$$

y llevando todo a un lado de la ecuación y sacando factor común $\hat{w}(z)$ obtenemos

$$\left[\partial_x^2 + \frac{i}{k} \frac{2(z-1)}{(z+1)} - V_d \right] \hat{w}(z)$$

Es decir, obtenemos (1.13) para

$$\delta(z) = \frac{2(z-1)}{(z+1)},$$

que coincide con la fórmula general (1.14) para el caso de la regla del trapecio.

Ejemplo 2: Método Euler implícito.

El método de Euler implícito viene dado por

$$u_{n+1} = y_n + kf(t_{n+1}, u_{n+1}).$$

Dicho método se llama implícito debido a que el lado derecho es dependiente de u_{n+1} y cada paso involucra resolver el procedimiento de iteración para y_{n+1} . En nuestro caso, como la función f tiene la forma $f(t, u) = i(\partial_x^2 - V(x, t))u$, obtenemos

$$u^{n+1} = u^n + k [i(\partial_x^2 - V^{n+1}(x))u^{n+1}].$$

Multiplicando a ambos miembros de la igualdad anterior por i e intercambiando algunos términos obtenemos que

$$\frac{i}{k} (u^{n+1} - u^n) = (-\partial_x^2 + V^{n+1}(x)) u^{n+1}.$$

Seguimos, en primer lugar, los pasos tomados en el ejemplo anterior. Para ello, consideremos el problema exterior derecho

$$i \frac{w^{n+1} - w^n}{k} = (-\partial_x^2 + V_d) w^{n+1},$$

donde el potencial es constante, por tanto, $V^n = V^{n+1} = V_d$. Multiplicando a ambos miembros de la igualdad anterior por z^{-n} ésta se traduce en

$$i \frac{w^{n+1} z^{-n} - w^n z^{-n}}{k} = (-\partial_x^2 + V_r) w^{n+1} z^{-n},$$

si descomponemos $z^{-n} = z^{-(n+1)}z$, obtenemos que la ecuación anterior se reescribe como

$$i \frac{w^{n+1} z^{-(n+1)} z - w^n z^{-n}}{k} = (-\partial_x^2 + V_d) w^{n+1} z^{-(n+1)} z.$$

Sumando para todo $n \in \mathbb{N}_0$ y usando la definición de \mathcal{Z} -transformada obtenemos que

$$i \frac{z\hat{w}(z) - \hat{w}(z)}{k} = (-\partial_x^2 + V_d) z\hat{w}(z),$$

que se puede reescribir como

$$i\hat{w}(z) \frac{z-1}{k} = (-\partial_x^2 + V_d) z\hat{w}(z).$$

Dividiendo por z en sendos miembros de la ecuación anterior obtenemos que

$$\hat{w}(z) \frac{i}{k} \frac{z-1}{z} = (-\partial_x^2 + V_d) \hat{w}(z).$$

Finalmente, llevando todo a un lado de la ecuación y sacando factor común $\hat{w}(z)$ obtenemos

$$\left(\partial_x^2 + \frac{i}{k} \frac{z-1}{z} - V_d \right) \hat{w}(z) = 0,$$

es decir, obtenemos (1.13) para

$$\delta(z) = \frac{z-1}{z},$$

que coincide con la fórmula general (1.14) para el caso de Euler implícito.

Tras haber calculado en dos casos particulares la expresión de $\delta(z)$, volvamos a la ecuación (1.13). Las condiciones de frontera transparentes semidiscretas en tiempo para la ecuación lineal de Schrödinger se obtienen resolviendo dicha ecuación diferencial

$$\left(\partial_x^2 + i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right) \hat{w}(z) = 0, \quad x > x_d, \quad (1.16)$$

es decir,

$$\partial_x^2 \hat{w}(z) + \left(i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right) \hat{w}(z) = 0, \quad x > x_d.$$

Para hallar la solución de esta ecuación diferencial ordinaria tomemos su polinomio característico con variable y , que viene determinado por

$$p(y) = y^2 + \left(i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right).$$

Las raíces de este polinomio característico son

$$y^2 + \left(i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right) = 0 \Rightarrow y^2 = \left(-i \frac{\delta(z)}{k} + V_d \right) \Rightarrow y = \pm \sqrt{-i \frac{\delta(z)}{\Delta_t} + V_d}.$$

Donde las soluciones de y encontradas pueden reescribirse como

$$y = \pm \sqrt{-1 \left(i \frac{\delta(z)}{k} - V_d \right)} = \pm i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta_t} - V_d}.$$

Luego, la solución general de la ecuación diferencial es

$$\hat{w}(x, z) = A(z) e^{i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d}x} + B(z) e^{-i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d}x}, \quad \forall x > x_d,$$

al igual que en el caso de la condición de frontera transparente continua, la raíz cuadrada que se ha tomado es aquella cuya rama tiene parte real positiva. Para que la solución u^n pertenezca a $L^2(\Omega_d)$, el coeficiente B debe anularse. Esto se debe al hecho de que la función generatriz $\delta(z)$ lleva el trozo de plano $\{|z| > 1\}$ al semiplano derecho $\{\operatorname{Re}(z) > 0\}$ debido a la A -estabilidad de los métodos multipaso utilizados, y por tanto

$$\operatorname{Re} \left(-i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d} \right) > 0, \quad \forall |z| > 1.$$

En consecuencia, la solución viene escrita de la forma

$$\hat{w}(x, z) = A(z) e^{i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d}x}, \quad \forall x > x_d.$$

Derivando en ambos miembros de la expresión anterior respecto de la variable espacial, obtenemos que

$$\partial_x \hat{w}(x, z) = A(z) i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d} e^{i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d}x} = i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d} \hat{w}(x, z),$$

en $x = x_d$. Se puede reescribir como

$$\mathcal{Z}(\partial_x w^n)(z) = i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{k} - V_d} \mathcal{Z}(w^n)(z), \quad (1.17)$$

en $x = x_d$. Tomando \mathcal{Z} -transformada inversa a ambos lados de la igualdad precedente obtenemos la condición de frontera transparente que nos ocupa, que es una expresión de $\partial_x w^n(x_d)$ en términos de $\partial_x w^k(x_d)$ para $0 \leq k \leq n$. Además, ésta es una convolución temporalmente discreta que depende de la función generatriz $\delta(z)$.

Nótese que las condiciones de frontera transparentes son no locales, lo cual, a la hora de la implementación del algoritmo final supone un elevado coste computacional.

Veamos a continuación, como queda la condición de frontera transparente para el ejemplo 1. Presentamos la \mathcal{Z} transformada inversa que es esencial para formular las condiciones de frontera transparentes discretas en el espacio físico (teorema extraído de [2])

Teorema 1.2.1. (\mathcal{Z} transformada inversa) Si (f_n) es una secuencia acotada exponencialmente, y $\hat{f}(z)$ es la \mathcal{Z} -transformada, entonces la \mathcal{Z} transformada inversa viene dada por

$$f_n = \mathcal{Z}^{-1}(\hat{f}(z)) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \hat{f}(z) z^{n-1} dz, \quad \text{para } n \in \mathbb{N}_0,$$

donde \mathcal{C} denota un círculo alrededor del origen con un radio suficientemente grande.

Una fórmula importante es la \mathcal{Z} transformada inversa de un producto:

$$\mathcal{Z}^{-1}(\hat{f}(z)\hat{g}(z)) = f_n * g_n = \sum_{k=0}^n f_k g_{n-k}.$$

Veamos finalmente, cómo usando la \mathcal{Z} -transformada inversa podemos obtener unas condiciones de frontera transparentes. Vamos a verlo para el caso de la regla de los trapecios:

Usando la fórmula anterior de la \mathcal{Z} transformada inversa de un producto, la \mathcal{Z} transformada inversa en (1.17) queda expresada de la forma

$$\partial_x(w^n) = \mathcal{Z}^{-1} \left(i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{k}} - V_d \mathcal{Z}(w^n)(z) \right) = g_n * w^n = \sum_{k=0}^n g_k w^{n-k}.$$

Obtenemos por tanto que el problema interior del ejemplo 1 viene determinado por

$$\begin{aligned} i \frac{v^{n+1} - v^n}{k} &= -\partial_x^2 \frac{v^{n+1} + v^n}{2} + \frac{V^{n+1}(x)v^{n+1} + V^n(x)v^n}{2}, & x \in \Omega, \forall n \in \mathbb{N}, \\ v^0 &= u_0(x), & x \in \Omega, \\ \partial_n v^{n+1} &= \sum_{k=0}^{n+1} \psi_k^{(i,d)} v^{n+1-k}, & \text{en } x = x_i, x_d, \end{aligned} \quad (1.18)$$

donde los pesos $\psi_n^{(i,d)}$ viene dados por

$$\hat{\psi}(z) = \mathcal{Z}(\psi_n^{(i,d)})(z) = i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{k}} - V_{i,d}.$$

Los pesos ψ_n se pueden obtener analíticamente o numéricamente, dependiendo de δ y del potencial $V_{i,d}$. En el caso de la regla de los trapecios y de un potencial nulo, obtenemos explícitamente los coeficientes (véase [2, 7, 31])

$$\psi_k = -e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{2}{k}} (-1)^k \tilde{\psi}_k, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

donde los $\tilde{\psi}_k$ vienen determinados por [2, 7, 31]

$$(\tilde{\psi}_0, \tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_3, \tilde{\psi}_4, \tilde{\psi}_5, \dots) = \left(1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \dots \right).$$

1.3. Condiciones de frontera transparentes semidiscretas en espacio

Cuando se utiliza el método de líneas para resolver numéricamente una ecuación en derivadas parciales, se puede optar por discretizar primero en tiempo y después en espacio o al revés, es decir, considerar primero una discretización espacial de la ecuación y a continuación la integración temporal.

En la sección 1.2 hemos considerado primero la discretización en tiempo de la ecuación lineal de Schrödinger y hemos construido condiciones de frontera transparentes para el problema semidiscreto en tiempo. En esta sección vamos a considerar primero una discretización en espacio de la ecuación y a obtener condiciones de frontera transparentes para el problema semidiscreto en espacio. Aunque con diferencias en la técnica con la que vamos a obtener condiciones

de frontera transparentes (utilizaremos la técnica de [10]), seguiremos la idea desarrollada en [3, 5] donde se construyen condiciones de frontera transparentes para la ecuación

$$\begin{aligned}\partial_t u(x, t) &= \frac{-i}{c} (\partial_x^2 u(x, t) + Vu(x, t)), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}.\end{aligned}\tag{1.19}$$

En [3] y [5] se considera el caso $c > 0$. Nótese que la ecuación que nosotros estamos considerando (1.1) no está incluida en este caso, sino en el caso $c < 0$.

En concreto, vamos a considerar un esquema de diferencias finitas de orden dos para la discretización espacial. Para ello, consideramos una red uniforme del intervalo $[x_i, x_d]$: $\{x^j : 0 \leq j \leq J\}$, donde $x^j = x_i + jh$, $j = 0, \dots, J$ con $h = L/J$, y $L = x_d - x_i$. Usaremos $v^j(t)$ para denotar la aproximación a $v(x^j, t)$ obtenida con esta discretización. Consideraremos la siguiente aproximación de orden 2 a la derivada segunda:

$$\partial_x^2 v(x^j, t) \approx D_x^2 v^j(t) = \frac{v^{j+1}(t) - 2v^j(t) + v^{j-1}(t)}{h^2}\tag{1.20}$$

De esta manera, la discretización espacial de la ecuación en el dominio interior $[x_i, x_d]$ viene dada por

$$i \frac{d}{dt} v^j(t) = -\frac{1}{h^2} (v^{j-1}(t) - 2v^j(t) + v^{j+1}(t)) + V^j v^j, \quad j = 1, 2, \dots, J-1, \quad t > 0.$$

Para obtener las condiciones de frontera transparentes para este problema semidiscreto, consideramos esta misma discretización espacial en el dominio exterior derecho (haciendo un razonamiento similar para el problema exterior izquierdo)

$$\begin{aligned}i \frac{d}{dt} w^j &= -\frac{1}{h^2} (w^{j-1} - 2w^j + w^{j+1}) + V_d w^j, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad t > 0, \\ w^J(t) &= v^J(t), \quad t > 0, \\ \lim_{|j| \rightarrow \infty} w^j(t) &= 0, \quad t > 0, \\ w^j(0) &= 0, \quad j \in \mathbb{Z}.\end{aligned}\tag{1.21}$$

Aplicando la transformada de Laplace a ambos lados de la ecuación (1.21) obtenemos

$$is \hat{w}^j(s) + \frac{1}{h^2} (\hat{w}^{j-1}(s) - 2\hat{w}^j(s) + \hat{w}^{j+1}(s)) = V_d \hat{w}^j(s), \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\},$$

donde se ha usado la propiedad ii) de la transformada de Laplace (la transformada de Laplace de la derivada de una función). Multiplicando a la ecuación anterior por h^2 y llevando todos los términos a un miembro de la ecuación llegamos a que

$$\hat{w}^{j+1}(s) + (-2 + h^2 is - h^2 V_d) \hat{w}^j(s) + \hat{w}^{j-1}(s) = 0.$$

La ecuación anterior la reescribimos como

$$\hat{w}^{j+1}(s) + (-2 + h^2(is - V_d)) \hat{w}^j(s) + \hat{w}^{j-1}(s) = 0, \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\}.\tag{1.22}$$

Para resolver esta ecuación en diferencias tomamos el polinomio característico que viene asociado a dicha ecuación, que viene determinado por

$$p(\chi) = \chi^2 + (-2 + h^2(is - V_d))\chi + 1,$$

donde la variable χ es la variable del polinomio característico. Resolvemos

$$\chi^2 + (-2 + h^2(is - V_d))\chi + 1 = 0$$

obteniendo

$$\begin{aligned} \chi(s) &= \frac{2 - h^2(is - V_d) \pm \sqrt{(-2 + h^2(is - V_d))^2 - 4}}{2} = \\ &= 1 - \frac{h^2}{2}(is - V_d) \pm \sqrt{\left(-1 + \frac{h^2}{2}(is - V_d)\right)^2 - 1}. \end{aligned}$$

Operemos en el discriminante:

$$\begin{aligned} \left(-1 + \frac{h^2}{2}(is - V_d)\right)^2 - 1 &= 1 + \frac{h^4}{4}(is - V_d)^2 - h^2(is - V_d) - 1 = \\ &= \frac{h^4}{4}(is - V_d)^2 - h^2(is - V_d) = \frac{h^2}{2}(is - V_d) \left(\frac{h^2}{2}(is - V_d) - 2\right). \end{aligned}$$

Por tanto, las raíces del polinomio característico son

$$\chi_{\pm}(s) = 1 - \frac{h^2}{2}(is - V_d) \pm \sqrt{\frac{h^2}{2}(is - V_d) \left(\frac{h^2}{2}(is - V_d) - 2\right)}. \quad (1.23)$$

En consecuencia, la solución general de la ecuación diferencial es

$$\hat{w}^j(s) = A(s)\chi_+^{j-J}(s) + B(s)\chi_-^{j-J}(s), \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\}.$$

Se verifica que $\chi_-(s) = (\chi_+(s))^{-1}$. Por tanto

$$\hat{w}^j(s) = A(s)\chi_+^{j-J}(s) + B(s)\chi_+^{-(j-J)}(s), \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\}.$$

Para que la solución pertenezca a $L^2(\Omega^d)$, el coeficiente B debe anularse. Por tanto, la solución viene escrita de la forma

$$\hat{w}^j(s) = A(s)\chi_+^{j-J}(s), \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\}.$$

Por el acoplamiento de los problemas exteriores al problema interior, sabemos que para $j = J$ tenemos $w^J(t) = v^J(t)$, tomando transformadas de Laplace tenemos

$$\hat{v}^J(s) = \hat{w}^J(s) = A(s),$$

ya que cuando $j = J$ tenemos que $\chi_+^{j-J}(s) = \chi_+^{J-J}(s) = 1$. Luego

$$\hat{w}^j(s) = \hat{v}^J(s)\chi_+^{j-J}(s), \quad j \in \{J+1, J+2, \dots\}. \quad (1.24)$$

Tomando en (1.24) $j = J-1$ tenemos que

$$\hat{v}^{J-1}(s) = \hat{v}^J(s)\chi_+^{J-1-J}(s) = \hat{v}^J(s)\chi_+^{-1}(s). \quad (1.25)$$

Teniendo en cuenta que $\chi_+^{-1}(s) = \chi_-(s)$, obtenemos

$$\hat{v}^{J-1}(s) = \left[1 - \frac{h^2}{2}(is - V_d) - \sqrt{\frac{h^2}{2}(is - V_d) \left(\frac{h^2}{2}(is - V_d) - 2 \right)} \right] \hat{v}^J(s) \quad (1.26)$$

que es la condición de frontera transparente semidiscreta derecha, en términos de la transformada de Laplace, asociada a la discretización mediante diferencias finitas de segundo orden que hemos considerado. Un razonamiento similar permite obtener la condición de frontera transparente semidiscreta para la frontera izquierda

$$\hat{v}^1(s) = \left[1 - \frac{h^2}{2}(is - V_d) - \sqrt{\frac{h^2}{2}(is - V_d) \left(\frac{h^2}{2}(is - V_d) - 2 \right)} \right] \hat{v}^0(s). \quad (1.27)$$

1.4. Condiciones de frontera transparentes totalmente discretas

Existe la posibilidad de obtener condiciones de frontera transparentes para un problema totalmente discreto, tanto en tiempo como en espacio (véase [10] y las referencias allí mencionadas). Sin embargo, dichas condiciones de frontera vuelven a ser no locales y por tanto costosas computacionalmente hablando, por lo que su interés práctico disminuye. Por ello, no vamos a desarrollar en este trabajo estas condiciones de frontera totalmente discretas y vamos a pasar, en el capítulo siguiente, a desarrollar condiciones de frontera absorbentes locales cuyo interés práctico es mayor.

Capítulo 2

Condiciones de frontera absorbentes para la ecuación lineal de Schrödinger

Como hemos explicado desde el principio de este trabajo, para resolver numéricamente un problema de evolución de ecuaciones en derivadas parciales definido en un dominio infinito, es necesario restringir el problema a un subdominio finito (en nuestro caso $\Omega = [x_i, x_d]$) e imponer las condiciones de frontera artificiales. Si la solución de este nuevo problema coincide con la restricción de la solución del problema original, las condiciones de frontera se llaman transparentes. Sin embargo, aunque estas condiciones de frontera evitan la existencia de reflejos cuando la solución llega a la frontera, en muchos casos, incluida la ecuación que nos ocupa, las condiciones de frontera transparentes son no locales. Es por ello, que en la práctica se prefiere utilizar otro tipo de condiciones que son locales, y por tanto mucho menos costosas computacionalmente, las condiciones de frontera locales absorbentes. Estas condiciones de frontera se construyen como aproximación de las condiciones de frontera transparentes y tienen el inconveniente de permitir pequeños reflejos de la solución en la frontera. Por ello es importante estudiar hasta qué punto se puede obtener una buena absorción de la solución cuando llega a la frontera. En el presente capítulo vamos a obtener condiciones de frontera absorbentes para la ecuación lineal de Schrödinger (1.1) y en el capítulo siguiente, realizaremos experimentos numéricos para estudiar el nivel de absorción de las condiciones de frontera absorbentes construidas y la forma óptima de elegir los parámetros de los que dependen las condiciones de frontera absorbentes para que la absorción en la frontera sea lo mayor posible.

2.1. Condiciones frontera absorbentes continuas

En esta sección vamos a obtener condiciones frontera absorbentes considerando una aproximación a las condiciones de frontera transparentes continuas obtenidas en la sección 1.1. Para ello, utilizaremos aproximaciones mediante funcionales racionales de interpolación con numerador y denominador no necesariamente del mismo grado. Éste constituye un caso más general que el llevado a cabo en [15] donde los grados de los polinomios del numerador y del denominador de la función racional eran idénticos y dónde los nodos de interpolación se eligen para obtener aproximaciones por mínimos cuadrados al símbolo de Fourier de la condición de frontera transparente en un intervalo dado. Aunque con alguna diferencia en la técnica, vamos a seguir la línea de [2] donde se obtienen condiciones de frontera absorbentes locales para la

ecuación (1.19) en el caso $c > 0$ (nótese que nuestra ecuación (1.1) no está incluida en este caso). Otros trabajos relacionados son [14], [16], [17] y [28].

Tras la obtención en la subsección 2.1.1 de varios casos de condiciones de frontera absorbentes continuas, pasaremos a proponer en la subsección 2.1.2 una discretización espacial de la ecuación lineal de Schrödinger en el dominio interior $[x_i, x_d]$, así como discretizaciones espaciales de las distintas condiciones de frontera absorbentes obtenidas en 2.1.1.

2.1.1. Obtención de condiciones frontera absorbentes continuas

En la sección 1.1 del capítulo precedente se obtuvieron condiciones de frontera transparentes continuas para la ecuación (1.1) que vienen dadas por (1.9) y (1.10) y que recordamos ahora:

$$\partial_x \hat{u}(x_i, s) = \sqrt{V_i - is} \hat{u}(x_i, s), \quad (2.1)$$

$$\partial_x \hat{u}(x_d, s) = -\sqrt{V_d - is} \hat{u}(x_d, s). \quad (2.2)$$

Nuestro propósito es aproximar estas condiciones de frontera que son no locales por otras que sí lo sean. Vamos a centrarnos en la condición de frontera derecha en x_d , pues el razonamiento para la frontera izquierda es totalmente similar. Vamos a considerar aproximaciones de la forma

$$\sqrt{V_d - is} \approx q(V_d - is), \quad (2.3)$$

donde $q(\eta)$ es una función racional que interpola a la función $\sqrt{\eta}$. Más precisamente,

$$q(\eta) = \frac{p_1(\eta)}{p_2(\eta)}$$

donde $p_1(\eta)$ y $p_2(\eta)$ son dos polinomios relativamente primos de grados j_1 y j_2 , respectivamente. A las condiciones de frontera absorbentes obtenidas al usar la aproximación (2.3) en las condiciones de frontera transparentes (2.1)-(2.2) las llamaremos CFA(j_1, j_2) y al número natural $j_1 + j_2 + 1$, orden de absorción. Nótese que las condiciones de frontera absorbentes dependen de $j_1 + j_2 + 1$ nodos de interpolación que denotaremos por η_j^2 , para $j = 1, 2, \dots, j_1 + j_2 + 1$. A continuación, vamos a deducir algunas condiciones de frontera absorbentes para la ecuación lineal de Schrödinger (1.1) y que reescribimos aquí considerando el dominio interior $[x_i, x_d]$

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u + V(x, t)u, \quad x \in [x_i, x_d], \quad t > 0, \quad (2.4)$$

donde el potencial verifica

$$V(x, t) = \begin{cases} V_i & \text{si } x \leq x_i, \\ V_d & \text{si } x \geq x_d. \end{cases}$$

Dependiendo de la elección de la función racional $q(\eta)$ obtendremos diferentes condiciones de frontera absorbentes con distinto orden de absorción.

Obtención de la condición de frontera absorbente CFA(1,0)

En primer lugar, vamos a obtener la condición de frontera absorbente CFA(1,0). Para ello, consideramos en (2.3) el polinomio $q(\eta) = \alpha_0 + \alpha_1 \eta$ que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en dos nodos η_1^2 y η_2^2 , siendo $\eta_j \geq 0$ para $j = 1, 2$. En el siguiente teorema obtenemos las CFA(1,0).

Teorema 2.1.1. Las condiciones de frontera absorbentes CFA(1,0) para la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) son las siguientes

$$\partial_x u(x_i, t) - \beta_{1,i} u(x_i, t) - \beta_{2,i} \partial_t u(x_i, t) = 0, \quad (2.5)$$

$$\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} u(x_d, t) + \beta_{2,d} \partial_t u(x_d, t) = 0, \quad (2.6)$$

donde

$$\beta_{1,l} = \frac{\eta_1 \eta_2 + V_l}{\eta_1 + \eta_2} \quad \text{y} \quad \beta_{2,l} = \frac{-i}{\eta_1 + \eta_2}, \quad l = i, d.$$

donde se ha utilizado la notación introducida previamente para los nodos η_j .

Demostración. Vamos a obtener la CFA(1,0) para la frontera derecha (2.6), siendo totalmente análogo el razonamiento para obtener la CFA(1,0) para la frontera izquierda (2.5).

En primer lugar, hemos obtenido el polinomio $q(\eta) = \alpha_0 + \alpha_1 \eta$ que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en los nodos η_1^2 y η_2^2 y que viene dado por la siguiente expresión

$$q(s) = \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} + \frac{\eta}{\eta_1 + \eta_2}. \quad (2.7)$$

Ahora, usando la aproximación (2.3) y teniendo en cuenta la expresión del polinomio (2.7), tenemos

$$\sqrt{V_d - is} \approx q(V_d - is) = \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} + \frac{V_d - is}{\eta_1 + \eta_2} = \frac{\eta_1 \eta_2 + V_d}{\eta_1 + \eta_2} - i \frac{s}{\eta_1 + \eta_2}$$

Y sustituyendo esta aproximación en (2.2) tenemos

$$\partial_x \hat{u}(x_d, s) = - \left[\frac{\eta_1 \eta_2 + V_d}{\eta_1 + \eta_2} - i \frac{s}{\eta_1 + \eta_2} \right] \hat{u}(x_d, s) \quad (2.8)$$

Tomando transformada inversa de Laplace, obtenemos la CFA(1,0) para la frontera derecha x_d ,

$$\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} u(x_d, t) + \beta_{2,d} \partial_t u(x_d, t) = 0,$$

donde

$$\beta_{1,d} = \frac{\eta_1 \eta_2 + V_d}{\eta_1 + \eta_2} \quad \text{y} \quad \beta_{2,d} = \frac{-i}{\eta_1 + \eta_2}, \quad (2.9)$$

Nótese que al tomar transformada inversa de Laplace se ha tenido en cuenta la propiedad (1.7) y que $u(x_d, 0) = 0$. □

Como se ha visto en el teorema anterior, las CFA(1,0) dependen de dos parámetros η_1 , y η_2 que no son necesariamente iguales. Sin embargo, en ocasiones será interesante que los dos parámetros tomen un mismo valor. En este caso las CFA(1,0) resultarían ser las indicadas en el siguiente corolario deducido de manera trivial del teorema anterior en el que también se supone que el potencial se anula fuera del dominio interior, que es un caso particular que vamos a considerar en la sección de experimentos numéricos.

Corolario 2.1.1. Consideremos la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) con un potencial que verifica

$$V(x, t) = 0, \quad \forall x \notin [x_i, x_d].$$

Las condiciones de frontera absorbentes CFA(1,0) dadas por (2.5)-(2.6) en el caso en el que $\eta_1 = \eta_2 = b$ son las siguientes

$$\partial_x u(x_i, t) - \frac{b}{2}u(x_i, t) + \frac{i}{2b}\partial_t u(x_i, t) = 0, \quad (2.10)$$

$$\partial_x u(x_d, t) + \frac{b}{2}u(x_d, t) - \frac{i}{2b}\partial_t u(x_d, t) = 0. \quad (2.11)$$

Demostración. Este resultado es simplemente un caso particular del teorema precedente en el que los coeficientes η_1 y η_2 tienen como valor b y en el que el potencial es nulo fuera del dominio interior, tal y como se nos indica en las hipótesis del enunciado. En este caso, para la frontera derecha los coeficientes de las CFA(1,0), teniendo en cuenta que en este caso particular $\eta_1 = \eta_2 = b$ y $V_d = 0$, son

$$\begin{aligned} \beta_{1,d} &= \frac{\eta_1\eta_2 + V_d}{\eta_1 + \eta_2} = \frac{b}{2}, \\ \beta_{2,d} &= \frac{-i}{\eta_1 + \eta_2} = -\frac{i}{2b}, \end{aligned}$$

luego, la CFA(1,0) derecha en este caso viene dada por la expresión (2.11):

$$\partial_x u(x_d, t) + \frac{b}{2}u(x_d, t) - \frac{i}{2b}\partial_t u(x_d, t) = 0,$$

Un razonamiento análogo permite obtener la condición de frontera absorbente CFA(1,0) para la frontera izquierda en este caso particular, dada por la expresión (2.10):

$$\partial_x u(x_i, t) - \frac{b}{2}u(x_i, t) + \frac{i}{2b}\partial_t u(x_i, t) = 0.$$

□

Obtención de la condición de frontera absorbente CFA(1,1)

A continuación, vamos a obtener la condición de frontera absorbente CFA(1,1). Para ello, consideramos en (2.3) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta}{\alpha_2 + \eta}$$

que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en los nodos η_1^2 , η_2^2 y η_3^2 .

Teorema 2.1.2. Las condiciones de frontera absorbentes CFA(1,1) para la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) son las siguientes

$$\beta_{0,i}\partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i}\partial_{xt}u(x_i, t) - \beta_{2,i}u(x_i, t) - \beta_{3,i}\partial_t u(x_i, t) = 0, \quad (2.12)$$

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) = 0, \quad (2.13)$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{0,l} &= \eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V_l, \\ \beta_{1,l} &= -i, \\ \beta_{2,l} &= \eta_1\eta_2\eta_3 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)V_l, \\ \beta_{3,l} &= -i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3), \end{aligned}$$

con $l = i, d$, donde se ha utilizado la notación introducida previamente para los nodos η_j .

Demostración. Consideramos en (2.3) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta}{\alpha_2 + \eta} \quad (2.14)$$

que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en los nodos η_1^2 , η_2^2 y η_3^2 . Imponiendo las condiciones de interpolación y operando, hemos obtenido la expresión de los coeficientes α_0 , α_1 y α_2 en términos de η_1 , η_2 y η_3

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \eta_1\eta_2\eta_3, \\ \alpha_1 &= \eta_1 + \eta_2 + \eta_3, \\ \alpha_2 &= \eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3, \end{aligned} \quad (2.15)$$

Para obtener la condición de frontera CFA(1,1), utilizamos la aproximación (2.3) en la condición de frontera transparente (2.2), teniendo en cuenta que la función racional $q(\eta)$ viene dada en este caso por (2.14). Tenemos entonces:

$$\partial_x \hat{u}(x_d, s) = - \left[\frac{\alpha_0 + \alpha_1(V_d - is)}{\alpha_2 + V_d - is} \right] \hat{u}(x_d, s).$$

Operando, se tiene

$$(\alpha_2 + V_d)\partial_x \hat{u}(x_d, s) - is\partial_x \hat{u}(x_d, s) = -(\alpha_0 + \alpha_1 V_d)\hat{u}(x_d, s) + i\alpha_1 s\hat{u}(x_d, s).$$

Por último, tomando transformada inversa de Laplace, obtenemos la condición de frontera absorbente CFA(1,1) para la frontera derecha:

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{0,d} &= \alpha_2 + V_d = \eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V_d, \\ \beta_{1,d} &= -i, \\ \beta_{2,d} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_d = \eta_1\eta_2\eta_3 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)V_d, \\ \beta_{3,d} &= -i\alpha_1 = -i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Un razonamiento análogo permite obtener la condición de frontera absorbente CFA(1,1) para la frontera izquierda:

$$\beta_{0,i}\partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i}\partial_{xt}u(x_i, t) - \beta_{2,i}u(x_i, t) - \beta_{3,i}\partial_t u(x_i, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{0,i} &= \alpha_2 + V_i = \eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V_i, \\ \beta_{1,i} &= -i, \\ \beta_{2,i} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_i = \eta_1\eta_2\eta_3 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)V_i, \\ \beta_{3,i} &= -i\alpha_1 = -i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3). \end{aligned} \quad (2.17)$$

□

Como hemos visto en el teorema anterior, las CFA(1,1) dependen de tres parámetros η_1, η_2 y η_3 que no son necesariamente iguales. Sin embargo, en ocasiones será interesante que los tres parámetros tomen un mismo valor. En este caso las CFA(1,1) resultarían ser las indicadas en el siguiente corolario deducido de manera trivial del teorema anterior en el que también se supone que el potencial se anula fuera del dominio interior, que es un caso particular que vamos a considerar en la sección de experimentos numéricos.

Corolario 2.1.2. Consideremos la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) con un potencial que verifica

$$V(x, t) = 0, \quad \forall x \notin [x_i, x_d].$$

Las condiciones de frontera absorbentes CFA(1,1) dadas por (2.12)-(2.13) en el caso en el que $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = b$ son las siguientes

$$3b^2 \partial_x u(x_i, t) - i \partial_{xt} u(x_i, t) - b^3 u(x_i, t) + 3ib \partial_t u(x_i, t) = 0, \quad (2.18)$$

$$3b^2 \partial_x u(x_d, t) - i \partial_{xt} u(x_d, t) + b^3 u(x_d, t) - 3ib \partial_t u(x_d, t) = 0. \quad (2.19)$$

Demostración. Este resultado es simplemente un caso particular del teorema precedente en el que los coeficientes η_1, η_2 y η_3 tienen como valor b y en el que el potencial es nulo, tal y como se nos indica en las hipótesis del enunciado. Por lo que para averiguar el valor de los coeficientes α_0, α_1 y α_2 tendríamos que sustituir el valor que hemos tomado de los η_i en las expresiones (2.15), es decir,

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \eta_1 \eta_2 \eta_3 = b^3, \\ \alpha_1 &= \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 = 3b, \\ \alpha_2 &= \eta_2 \eta_3 + \eta_1 \eta_2 + \eta_1 \eta_3 = 3b^2. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Para obtener las expresiones (2.18)-(2.19) simplemente hay que acudir a los valores de los coeficientes $\beta_{j,i}$ y $\beta_{j,d}$ que vienen determinados en las expresiones (2.16) y (2.17) teniendo en cuenta (2.20) y que $V_i = V_d = 0$, por tanto, obtenemos la condición de frontera absorbente CFA(1,1) para la frontera derecha:

$$\beta_{0,d} \partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} \partial_{xt} u(x_d, t) + \beta_{2,d} u(x_d, t) + \beta_{3,d} \partial_t u(x_d, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{0,d} &= \alpha_2 + V_d = 3b^2, \\ \beta_{1,d} &= -i, \\ \beta_{2,d} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_d = b^3, \\ \beta_{3,d} &= -i \alpha_1 = -3ib, \end{aligned}$$

luego obtenemos la expresión (2.19):

$$3b^2 \partial_x u(x_d, t) - i \partial_{xt} u(x_d, t) + b^3 u(x_d, t) - 3ib \partial_t u(x_d, t) = 0.$$

Un razonamiento análogo permite obtener la condición de frontera absorbente CFA(1,1) para la frontera izquierda:

$$\beta_{0,i} \partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i} \partial_{xt} u(x_i, t) - \beta_{2,i} u(x_i, t) - \beta_{3,i} \partial_t u(x_i, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,i} &= \alpha_2 + V_i = 3b^2, \\ \beta_{1,i} &= -i, \\ \beta_{2,i} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_i = b^3, \\ \beta_{3,i} &= -i\alpha_1 = -3ib.\end{aligned}$$

Así obtenemos la expresión (2.18):

$$3b^2 \partial_x u(x_i, t) - i \partial_{xt} u(x_i, t) - b^3 u(x_i, t) + 3ib \partial_t u(x_i, t) = 0.$$

□

Obtención de la condición de frontera absorbente CFA(2,1)

Consideramos ahora en (2.3) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1 \eta + \alpha_2 \eta^2}{1 + \alpha_3 \eta}$$

que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en los nodos η_1^2 , η_2^2 , η_3^2 y η_4^2 .

Teorema 2.1.3. Las condiciones de frontera absorbentes CFA(2,1) para la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) son las siguientes

$$\beta_{0,i} \partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i} \partial_{xt} u(x_i, t) - \beta_{2,i} u(x_i, t) - \beta_{3,i} \partial_t u(x_i, t) - \beta_{4,i} \partial_t^2 u(x_i, t) = 0, \quad (2.21)$$

$$\beta_{0,d} \partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} \partial_{xt} u(x_d, t) + \beta_{2,d} u(x_d, t) + \beta_{3,d} \partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d} \partial_t^2 u(x_d, t) = 0, \quad (2.22)$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,d} &= 1 + \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}} V_d, \\ \beta_{1,d} &= \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}}, \\ \beta_{2,d} &= \frac{d_{4,4}}{d_{4,3}} + \frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} V_d + \frac{1}{d_{4,3}} V_d^2, \\ \beta_{3,d} &= -i \frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} - 2i V_d \frac{1}{d_{4,3}}, \\ \beta_{4,d} &= -\frac{1}{d_{4,3}}\end{aligned} \quad (2.23)$$

siendo

$$\begin{aligned}d_{4,1} &= \eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4, \\ d_{4,2} &= \eta_1 \eta_2 + \eta_1 \eta_3 + \eta_1 \eta_4 + \eta_2 \eta_3 + \eta_2 \eta_4 + \eta_3 \eta_4, \\ d_{4,3} &= \eta_1 \eta_2 \eta_3 + \eta_1 \eta_2 \eta_4 + \eta_1 \eta_3 \eta_4 + \eta_2 \eta_3 \eta_4, \\ d_{4,4} &= \eta_1 \eta_2 \eta_3 \eta_4,\end{aligned} \quad (2.24)$$

con $l = i, d$, donde se ha utilizado la notación introducida previamente para los nodos η_j .

Demostración. Consideramos en (2.3) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta + \alpha_2\eta^2}{1 + \alpha_3\eta} \quad (2.25)$$

que interpola a la función $\sqrt{\eta}$ en los nodos $\eta_1^2, \eta_2^2, \eta_3^2$. Imponiendo las condiciones de interpolación y operando, hemos obtenido la expresión de los coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ y α_3 en términos de η_1, η_2, η_3 y η_4

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{d_{4,4}}{d_{3,4}}, \\ \alpha_1 &= \frac{d_{4,2}}{d_{3,4}}, \\ \alpha_2 &= \frac{1}{d_{3,4}}, \\ \alpha_3 &= \frac{d_{4,1}}{d_{3,4}}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

donde $d_{4,1}, d_{4,2}, d_{4,3}$ y $d_{4,4}$ vienen determinados por las expresiones (2.24).

Para obtener la condición de frontera CFA(2,1), utilizamos la aproximación (2.3) en la condición de frontera transparente (2.2), teniendo en cuenta que la función racional $q(\eta)$ viene dada en este caso por (2.25). Tenemos entonces:

$$\partial_x \hat{u}(x_d, s) = - \left[\frac{\alpha_0 + \alpha_1(V_d - is) + \alpha_2(V_d - is)^2}{1 + \alpha_3(V_d - is)} \right] \hat{u}(x_d, s).$$

Operando, se tiene

$$\begin{aligned} &(1 + \alpha_3 V_d) \partial_x \hat{u}(x_d, s) - is \alpha_3 \partial_x \hat{u}(x_d, s) = \\ &= -(\alpha_0 + \alpha_1 V_d + \alpha_2 V_d^2) \hat{u}(x_d, s) + (i\alpha_1 + 2iV_d \alpha_2) s \hat{u}(x_d, s) + \alpha_2 s^2 \hat{u}(x_d, s). \end{aligned}$$

Tomando transformada inversa de Laplace a ambos lados de la igualdad anterior tenemos

$$\begin{aligned} &(1 + \alpha_3 V_d) \partial_x u(x_d, t) - i\alpha_3 \partial_{xt} u(x_d, t) = \\ &= -(\alpha_0 + \alpha_1 V_d + \alpha_2 V_d^2) u(x_d, t) + (i\alpha_1 + 2iV_d \alpha_2) \partial_t u(x_d, t) + \alpha_2 \partial_t^2 u(x_d, t). \end{aligned}$$

Obtenemos así la condición de frontera absorbente CFA(2,1) para la frontera derecha:

$$\beta_{0,d} \partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} \partial_{xt} u(x_d, t) + \beta_{2,d} u(x_d, t) + \beta_{3,d} \partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d} \partial_t^2 u(x_d, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_{0,d} &= 1 + \alpha_3 V_d = 1 + \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}} V_d, \\ \beta_{1,d} &= -i\alpha_3 = \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}}, \\ \beta_{2,d} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_d + \alpha_2 V_d^2 = \frac{d_{4,4}}{d_{4,3}} + \frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} V_d + \frac{1}{d_{4,3}} V_d^2, \\ \beta_{3,d} &= -i\alpha_1 - 2iV_d \alpha_2 = -i \frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} - 2iV_d \frac{1}{d_{4,3}}, \\ \beta_{4,d} &= -\alpha_2 = -\frac{1}{d_{4,3}} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Un razonamiento análogo permite obtener la condición de frontera absorbente CFA(2,1) para la frontera izquierda:

$$\beta_{0,i}\partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i}\partial_{xt}u(x_i, t) - \beta_{2,i}u(x_i, t) - \beta_{3,d}\partial_t u(x_i, t) - \beta_{4,i}\partial_t^2 u(x_i, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,i} &= 1 + \alpha_3 V_i = 1 + \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}} V_i, \\ \beta_{1,i} &= -i\alpha_3 = \frac{d_{4,1}}{d_{4,3}}, \\ \beta_{2,i} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_i + \alpha_2 V_i^2 = \frac{d_{4,4}}{d_{4,3}} + \frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} V_i + \frac{1}{d_{4,3}} V_i^2, \\ \beta_{3,i} &= -i\alpha_1 - 2iV_i\alpha_2 = -i\frac{d_{4,2}}{d_{4,3}} - 2i\frac{1}{d_{4,3}} V_i, \\ \beta_{4,i} &= -\alpha_2 = -\frac{1}{d_{4,3}}\end{aligned}\tag{2.28}$$

□

Como vimos en el teorema anterior, las CFA(2,1) dependen de cuatro parámetros η_1, η_2, η_3 y η_4 que no son necesariamente iguales. Sin embargo, en ocasiones será interesante que los cuatro parámetros tomen un mismo valor. En este caso las CFA(2,1) resultarían ser las indicadas en el siguiente corolario deducido de manera trivial del teorema anterior en el que también se supone que el potencial se anula fuera del dominio interior, que es un caso particular que vamos a considerar en la sección de experimentos numéricos.

Corolario 2.1.3. Consideremos la ecuación lineal de Schrödinger (2.4) con un potencial que verifica

$$V(x, t) = 0, \quad \forall x \notin [x_i, x_d].$$

Las condiciones de frontera absorbentes CFA(2,1) dadas por (2.21)-(2.22) en el caso en el que $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_4 = b$ son las siguientes

$$\beta_{0,i}\partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,i}u(x_i, t) + \beta_{3,i}\partial_t u(x_i, t) + \beta_{4,i}\partial_t^2 u(x_i, t) = 0, \tag{2.29}$$

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d}\partial_t^2 u(x_d, t) = 0, \tag{2.30}$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,l} &= 1, \\ \beta_{1,l} &= \frac{1}{b^2}, \\ \beta_{2,l} &= \frac{b}{4}, \\ \beta_{3,l} &= -\frac{3i}{2b}, \\ \beta_{4,l} &= -\frac{1}{4b^3},\end{aligned}$$

con $l = i, d$.

Demostración. Este resultado es simplemente un caso particular del teorema precedente en el que los coeficientes η_1, η_2, η_3 y η_4 tienen como valor b y en el que el potencial es nulo, tal y como se nos indica en las hipótesis del enunciado. Por lo que para averiguar el valor de los coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ y α_3 tendríamos que sustituir el valor que hemos tomado de los η_i en las expresiones (2.15), es decir,

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{d_{4,4}}{d_{3,4}} = \frac{b^4}{4b^3} = \frac{b}{4}, \\ \alpha_1 &= \frac{d_{4,2}}{d_{3,4}} = \frac{6b^2}{4b^3} = \frac{3}{2b}, \\ \alpha_2 &= \frac{1}{d_{3,4}} = \frac{1}{4b^3}, \\ \alpha_3 &= \frac{d_{4,1}}{d_{3,4}} = \frac{4b}{4b^3} = \frac{1}{b^2}.\end{aligned}\tag{2.31}$$

Para obtener las expresiones (2.29)-(2.30) simplemente hay que acudir a los valores de los coeficientes $\beta_{j,i}$ y $\beta_{j,d}$ que vienen determinados en las expresiones (2.27) y (2.28) teniendo en cuenta (2.31) y que $V_i = V_d = 0$, por tanto, obtenemos la condición de frontera absorbente CFA(2,1) para la frontera derecha:

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d}\partial_t^2 u(x_d, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,d} &= 1 + \alpha_3 V_d = 1, \\ \beta_{1,d} &= -i\alpha_3 = \frac{1}{b^2}, \\ \beta_{2,d} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_d + \alpha_2 V_d^2 = \frac{b}{4}, \\ \beta_{3,d} &= -i\alpha_1 - 2iV_d\alpha_2 = -\frac{3i}{2b}, \\ \beta_{4,d} &= -\alpha_2 = -\frac{1}{4b^3}.\end{aligned}$$

Un razonamiento análogo permite obtener la condición de frontera absorbente CFA(2,1) para la frontera izquierda:

$$\beta_{0,i}\partial_x u(x_i, t) + \beta_{1,i}\partial_{xt}u(x_i, t) - \beta_{2,i}u(x_i, t) - \beta_{3,i}\partial_t u(x_i, t) - \beta_{4,i}\partial_t^2 u(x_i, t) = 0,$$

donde

$$\begin{aligned}\beta_{0,i} &= 1 + \alpha_3 V_i = 1, \\ \beta_{1,i} &= -i\alpha_3 = \frac{1}{b^2}, \\ \beta_{2,i} &= \alpha_0 + \alpha_1 V_i + \alpha_2 V_i^2 = \frac{b}{4}, \\ \beta_{3,i} &= -i\alpha_1 - 2iV_i\alpha_2 = -\frac{3i}{2b}, \\ \beta_{4,i} &= -\alpha_2 = -\frac{1}{4b^3}.\end{aligned}$$

□

Acabamos de ver que las condiciones de frontera absorbentes dependen de unos nodos η_j . Una pregunta natural es ¿cómo se pueden elegir estos nodos para que la condición de frontera absorbente proporcione una buena absorción de la solución cuando ésta llega a la frontera? Para poder contestar a esta pregunta, pensemos en cuál sería una elección adecuada de los nodos si la solución de nuestra ecuación fuera una onda plana del tipo

$$u(x, t) = e^{i(\tau x - \omega(\tau)t)}. \quad (2.32)$$

Lo primero que debemos tener en cuenta es que para que (2.32) sea solución de la ecuación

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u + Vu,$$

se debe verificar que

$$\omega(\tau) = V + \tau^2.$$

Esta relación recibe el nombre de relación de dispersión.

Las condiciones de frontera absorbentes las estamos obteniendo a partir de las condiciones de frontera transparentes utilizando la aproximación

$$\sqrt{V - is} \approx q(V - is)$$

Si queremos que las condiciones de frontera absorbentes absorban la onda plana (2.32), nos interesa que $\sqrt{V - is} - q(V - is)$ sea pequeño para (2.32).

La idea para elegir los nodos adecuados es la siguiente. Puesto que la transformada de Laplace de la función $e^{-i\omega(\tau)t}$, determinada por $\mathcal{L}[e^{-i\omega(\tau)t}] = 1/(s + i\omega(\tau))$ se hace 'grande' cuando el denominador se aproxima a cero, nos interesa que la aproximación $\sqrt{V - is} \approx q(V - is)$ sea exacta cuando $s = -i\omega(\tau)$ y por tanto $V - is = -\tau^2$. Esta idea es la que nos permite elegir los nodos de la condición de frontera absorbente de manera adecuada para absorber (2.32).

Por otra parte, puesto que el objetivo final es integrar numéricamente la ecuación lineal de Schrödinger junto con una de las condiciones de frontera absorbentes que acabamos de deducir, a continuación vamos a proponer una discretización espacial, tanto en el dominio interior como en la frontera, para obtener un problema semidiscreto en espacio.

2.1.2. Discretización espacial de la ecuación y de las condiciones de frontera absorbentes continuas

En esta sección, en primer lugar, vamos a proponer una discretización espacial de la ecuación lineal de Schrödinger en el dominio interior. En segundo lugar, discretizaremos en espacio las distintas condiciones de frontera absorbentes CFA(j_1, j_2) obtenidas en la subsección 2.1.1. De esta forma, obtendremos un problema semidiscreto en espacio.

Por simplificar la notación, supondremos que el potencial $V(x, t)$ es constante, aunque el análisis cuando el potencial no es constante en el dominio interior sería similar. Por ello, en esta sección, cuando se haga referencia a los coeficientes de las condiciones de frontera absorbentes $\beta_{j,i}$, $\beta_{j,d}$, que dependen de V_i y V_d , respectivamente, tendremos en cuenta que estamos considerando el caso particular $V_i = V_d = V$.

Consideremos por tanto la ecuación lineal de Schrödinger

$$\partial_t u = i\partial_x^2 u - iVu, \quad x \in [x_i, x_d], \quad t > 0. \quad (2.33)$$

Para discretizar en espacio la ecuación (2.33), denotemos por $h = (x_d - x_i)/J > 0$, y por $x^j = x_i + jh$ para $j \in \{0, 1, \dots, J\}$ los nodos de una red uniforme del intervalo $[x_i, x_d]$. Denotemos además por $u^j(t)$ una aproximación a $u(x^j, t)$. La discretización espacial que vamos a considerar de la ecuación (2.33) en el dominio interior $[x_i, x_d]$ es el esquema de diferencias finitas de segundo orden dado por

$$\frac{d}{dt}u^j(t) = i \left(\frac{u^{j-1}(t) - 2u^j(t) + u^{j+1}(t)}{h^2} \right) - iVu^j(t), \quad 1 \leq j \leq J-1. \quad (2.34)$$

Esta expresión se puede reescribir como

$$\frac{d}{dt}u^j(t) = \frac{i}{h^2}u^{j-1}(t) + \left(\frac{-2i}{h^2} - iV \right) u^j(t) + \frac{i}{h^2}u^{j+1}(t), \quad j \in \{1, \dots, J-1\}$$

lo que es equivalente a esta otra expresión

$$\frac{d}{dt}u^j(t) = m_1 u^{j-1}(t) + m_2 u^j(t) + m_1 u^{j+1}(t), \quad j \in \{1, \dots, J-1\}, \quad (2.35)$$

donde

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{i}{h^2}, \\ m_2 &= \left(\frac{-2i}{h^2} - iV \right). \end{aligned} \quad (2.36)$$

En la expresión (2.36) los coeficientes m_1 y m_2 dependen de h , en estricto rigor se deberían denotar como $m_1(h)$ y $m_2(h)$, no se hará para no complicar más la notación.

A continuación pasamos a proponer una discretización espacial de las distintas condiciones de frontera absorbentes continuas CFA(j_1, j_2) que hemos obtenido anteriormente. Para ello, va a ser útil en esta sección, la siguiente aproximación de la derivada de orden dos en el nodo de la frontera derecha $x^J = x_d$

$$\partial_x^2 u(x^J, t) \approx \frac{2}{h^2} (u^{J-1}(t) - u^J(t) + h\partial_x u(x^J, t)), \quad (2.37)$$

y para el nodo de la frontera izquierda $x^0 = x_i$

$$\partial_x^2 u(x^0, t) \approx \frac{2}{h^2} (u^1(t) - u^0(t) - h\partial_x u(x^0, t)). \quad (2.38)$$

A continuación, vamos a examinar con detalle cómo se obtienen las CFA discretas para las CFA(j_1, j_2) estudiadas en la sección anterior.

Discretización espacial de CFA(1, 0).

Vamos a proponer una discretización espacial de la CFA(1,0), comenzando primero por la frontera derecha. Recordemos que la condición de frontera absorbente CFA(1,0) derecha para la ecuación (2.33) viene dada por la expresión (2.6), es decir,

$$\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d} u(x_d, t) + \beta_{2,d} \partial_t u(x_d, t) = 0,$$

donde los coeficientes $\beta_{j,d}$ viene dados por (2.9). Si despejamos el término de la derivada parcial, obtenemos

$$\partial_x u(x_d, t) = -\beta_{1,d} u(x_d, t) - \beta_{2,d} \partial_t u(x_d, t) = 0. \quad (2.39)$$

Lo que nos queda es proponer una aproximación a $\frac{d}{dt} u^j(t)$ en los casos $j = 0$ y $j = J$ en la que se incorporen las CFA(1,0), pues el resto de los nodos (los nodos interiores) vienen determinados por la expresión (2.35). Consideramos primero el caso $j = J$. Teniendo en cuenta la ecuación (2.33) y usando la aproximación (2.37) se llega a que

$$\frac{d}{dt} u^J(t) = i\partial_x^2 u(x^J, t) - iV u^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} [u^{J-1}(t) - u^J(t) + h\partial_x u(x^J, t)] - iV u^J(t). \quad (2.40)$$

Puesto que $x^J = x_d$, sustituyendo en la expresión (2.40) el valor de $\partial_x u(x^J, t)$ que viene determinado en (2.39), tenemos

$$\frac{d}{dt} u^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2} u^J(t) + \frac{2i}{h} \left[-\beta_{1,d} u^J(t) - \beta_{2,d} \frac{d}{dt} u^J(t) \right] - iV u^J(t).$$

Operando y juntando términos en la expresión anterior se llega a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} u^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2} u^J(t) - \frac{2i}{h} \beta_{1,d} u^J(t) - \frac{2i}{h} \beta_{2,d} \frac{d}{dt} u^J(t) - iV u^J(t) \\ \left[1 + \frac{2i}{h} \beta_{2,d} \right] \frac{d}{dt} u^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i}{h} \beta_{1,d} - iV \right] u^J(t) \\ \frac{d}{dt} u^J(t) &\approx \left(1 + \frac{2i}{h} \beta_{2,d} \right)^{-1} \left[\frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) + \left(-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i}{h} \beta_{1,d} - iV \right) u^J(t) \right] \end{aligned}$$

En consecuencia, podemos expresar $\frac{d}{dt} u^J(t)$ como

$$\frac{d}{dt} u^J(t) \approx \gamma_1 u^{J-1}(t) + \gamma_2 u^J(t), \quad (2.41)$$

donde los coeficientes γ_1 y γ_2 vienen determinados por las expresiones

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{\frac{2i}{h^2}}{1 + \frac{2i}{h} \beta_{2,d}} = \frac{2i}{h^2 + 2ih\beta_{2,d}}, \\ \gamma_2 &= \frac{-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i}{h} \beta_{1,d} - iV}{1 + \frac{2i}{h} \beta_{2,d}} = \frac{-2i - 2ih\beta_{1,d} - iVh^2}{h^2 + 2ih\beta_{2,d}}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Teniendo en cuenta que

$$\beta_{1,d} = \frac{\eta_1 \eta_2 + V}{\eta_1 + \eta_2} \quad \text{y} \quad \beta_{2,d} = \frac{-i}{\eta_1 + \eta_2}$$

podemos escribir los coeficientes γ_1 y γ_2 de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \frac{2i}{h^2 + 2ih \left(\frac{-i}{\eta_1 + \eta_2} \right)} = \frac{2i(\eta_1 + \eta_2)}{h^2(\eta_1 + \eta_2) + 2h}, \\ \gamma_2 &= \frac{-2i - 2ih \left(\frac{\eta_1 \eta_2 + V}{\eta_1 + \eta_2} \right) - iVh^2}{h^2 + 2ih \left(\frac{-i}{\eta_1 + \eta_2} \right)} = \frac{-2ih(\eta_1 \eta_2 + V) - i(2 + Vh^2)(\eta_1 + \eta_2)}{h^2(\eta_1 + \eta_2) + 2h}.\end{aligned}\tag{2.43}$$

A continuación, vamos a obtener una expresión similar a (2.41) pero con $j = 0$, es decir, cuando estamos en el extremo izquierdo $x_i = x^0$. Usando la aproximación (2.38) se llega a que

$$\frac{d}{dt}u^0(t) = i\partial_x^2 u(x^0, t) - iVu^0(t) \approx \frac{2i}{h^2} [u^1(t) - u^0(t) - h\partial_x u(x^0, t)] - iVu^0(t).\tag{2.44}$$

Puesto que $x^0 = x_i$, sustituyendo en la expresión anterior el valor de $\partial_x u(x^0, t)$ que viene determinado por la CFA(1,0) izquierda (2.5), tenemos

$$\frac{d}{dt}u^0(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^1(t) - \frac{2i}{h^2}u^0(t) - \frac{2i}{h} \left[\beta_{1,i}u^0(t) + \beta_{2,i}\frac{d}{dt}u^0(t) \right] - iVu^0(t).$$

Operando y juntando términos en la expresión anterior se llega a que

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u^0(t) &\approx \frac{2i}{h^2}u^1(t) - \frac{2i}{h^2}u^0(t) - \frac{2i}{h}\beta_{1,i}u^0(t) - \frac{2i}{h}\beta_{2,i}\frac{d}{dt}u^0(t) - iVu^0(t) \\ \frac{d}{dt}u^0(t) \left[1 + \frac{2i}{h}\beta_{2,i} \right] &\approx \frac{2i}{h^2}u^1(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i}{h}\beta_{1,i} - iV \right] u^0(t) \\ \frac{d}{dt}u^0(t) &\approx \left(1 + \frac{2i}{h}\beta_{2,i} \right)^{-1} \left[\frac{2i}{h^2}u^1(t) + \left(-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i}{h}\beta_{1,i} - iV \right) u^0(t) \right]\end{aligned}$$

En consecuencia, podemos expresar $\frac{d}{dt}u^0(t)$ como

$$\frac{d}{dt}u^0(t) \approx \gamma_1 u^1(t) + \gamma_2 u^0(t),\tag{2.45}$$

donde los coeficientes γ_1 y γ_2 vienen determinados por las expresiones (2.43).

Juntando las expresiones (2.35), (2.41) y (2.45) obtenemos el sistema diferencial de primer orden de la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}u^0(t) \approx \gamma_2 u^0(t) + \gamma_1 u^1(t), \\ \frac{d}{dt}u^1(t) = m_1 u^0(t) + m_2 u^1(t) + m_1 u^2(t), \\ \dots \\ \frac{d}{dt}u^{J-1}(t) = m_1 u^{J-2}(t) + m_2 u^{J-1}(t) + m_1^J(t), \\ \frac{d}{dt}u^J(t) \approx \gamma_2 u^J(t) + \gamma_1 u^{J-1}(t). \end{array} \right.$$

Expresando este sistema diferencial en forma matricial, obtenemos

$$U'(t) = M(h)U(t) \quad (2.46)$$

con $U(t) = [u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t)]^T$ y con matriz

$$M(h) = \begin{bmatrix} \gamma_2 & \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \gamma_1 & \gamma_2 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+1) \times (J+1)}, \quad (2.47)$$

donde los coeficientes γ_1 y γ_2 vienen dados por la expresión (2.43) y los coeficientes m_1 y m_2 dados por la expresión (2.36). Se ha usado la notación $M(h)$ para enfatizar que la matriz depende de h , pues las entradas no nulas de ésta dependen de este término.

En los experimentos numéricos de este trabajo vamos a considerar el caso particular en el que el potencial de la ecuación es nulo fuera del dominio interior, es decir $V = 0$, y, en cuanto a las condiciones de frontera absorbentes, vamos a considerar que los nodos η_i , de los que dependen, tengan todos el mismo valor (en el caso de la CFA(1,0) $\eta_1 = \eta_2 = b$). Por esta razón, detallamos a continuación este caso particular para la CFA(1,0). El problema semidiscreto en espacio para la CFA(1,0) en este caso particular, viene determinado por (2.46) con matriz (2.47) donde los coeficientes de la condición de frontera absorbente dependen de un único valor b

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{2ib}{bh^2 + h}, \\ \gamma_2 &= \frac{-ihb^2 - 2ib}{bh^2 + h}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Discretización espacial de CFA(1,1).

Vamos a proponer una discretización espacial de la condición de frontera CFA(1,1). Consideraremos únicamente el caso de la frontera derecha, siendo el razonamiento para la frontera izquierda totalmente análogo.

Recordemos que la condición de frontera absorbente CFA(1,1), en el caso de la frontera derecha, viene dada por la expresión (2.13), es decir,

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) = 0,$$

para los coeficientes $\beta_{j,d}$ dados por (2.16). Despejando el término de la derivada parcial, obtenemos

$$\partial_x u(x_d, t) = -\frac{1}{\beta_{0,d}} [\beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t)]. \quad (2.49)$$

Para obtener un problema semidiscreto en espacio, consideremos la ecuación (2.33) y usemos la aproximación (2.37), llegando a

$$\frac{d}{dt}u^J(t) = i\partial_x^2 u(x^J, t) - iVu^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} [u^{J-1}(t) - u^J(t) + h\partial_x u(x^J, t)] - iVu^J(t). \quad (2.50)$$

Puesto que $x^J = x_d$, sustituyendo en la expresión (2.50) el valor de $\partial_x u(x^J, t)$ que viene determinado en (2.49), tenemos

$$\frac{d}{dt}u^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}u^J(t) - \frac{2i}{h\beta_{0,d}} \left[\beta_{1,d}\partial_x u^J(t) + \beta_{2,d}u^J(t) + \beta_{3,d}\frac{d}{dt}u^J(t) \right] - iVu^J(t).$$

Denotando

$$v(x, t) = \partial_t u(x, t) \quad (2.51)$$

la expresión anterior se transforma en

$$v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}u^J(t) - \frac{2i}{h\beta_{0,d}} \left[\beta_{1,d}\partial_x v^J(t) + \beta_{2,d}u^J(t) + \beta_{3,d}v^J(t) \right] - iVu^J(t).$$

Operando y juntando términos en la expresión anterior se llega a

$$v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}u^J(t) - \frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}}\partial_x v^J(t) - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}}u^J(t) - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}}v^J(t) - iVu^J(t),$$

y por tanto,

$$\left[1 + \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] u^J(t) - \frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}}\partial_x v^J(t).$$

Si despejamos en la expresión anterior el término $\partial_x v^J(t)$ llegamos a que

$$\frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}}\partial_x v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] u^J(t) + \left[-1 - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] v^J(t),$$

es decir,

$$\partial_x v^J(t) \approx \left(\frac{h\beta_{0,d}}{2i\beta_{1,d}} \right) \left(\frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] u^J(t) + \left[-1 - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] v^J(t) \right).$$

La expresión anterior puede escribirse como

$$\partial_x v^J(t) \approx \gamma_0 u^{J-1}(t) + \gamma_1 u^J(t) + \gamma_2 v^J(t), \quad (2.52)$$

donde

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \left(\frac{\beta_{0,d}}{2i\beta_{1,d}} \right) \left(\frac{2i}{h^2} \right) = \frac{\beta_{0,d}}{h^2\beta_{1,d}} = \frac{\beta_{0,d}}{h^2\beta_{1,d}} = \frac{\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V}{-ih^2}, \\ \gamma_1 &= \left(\frac{h\beta_{0,d}}{2i\beta_{1,d}} \right) \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] = \frac{-2i\beta_{0,d} - 2ih\beta_{2,d} - iVh\beta_{0,d}}{2ih\beta_{1,d}} \\ &= \frac{(-2i - iVh^2)(\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V) - 2ih(\eta_1\eta_2\eta_3 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)V)}{2h}, \\ \gamma_2 &= \left(\frac{h\beta_{0,d}}{2i\beta_{1,d}} \right) \left[-1 - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] = \frac{-h\beta_{0,d} - 2i\beta_{3,d}}{2i\beta_{1,d}} \\ &= \frac{-h(\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V) - 2(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)}{2}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

donde se ha tenido en cuenta el valor de los coeficientes $\beta_{j,d}$, $j = 0, 1, 2$ dados por (2.16) y que estamos considerando el caso en el que el potencial es constante e igual a V y por tanto $V_d = V$.

Para calcular una aproximación a $\frac{d}{dt}v^J(t)$, derivando respecto de t en la ecuación (2.33), se tiene

$$\frac{d}{dt}v^J(t) = i\partial_x^2v(x^J, t) - iVv^J(t).$$

Ahora, utilizamos una aproximación para $\partial_x^2v(x^J, t)$ similar a la dada en (2.37) para $\partial_x^2u(x^J, t)$

$$\frac{d}{dt}v^J(t) = i\partial_x^2v(x^J, t) - iVv^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} [v^{J-1}(t) - v^J(t) + h\partial_xv(x^J, t)] - iVv^J(t). \quad (2.54)$$

Puesto que $x^J = x_d$, sustituyendo en la expresión (2.54) el valor de $\partial_xv(x^J, t)$ que viene determinado en (2.52), tenemos

$$\frac{d}{dt}v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2}v^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}v^J(t) + \frac{2i}{h} [\gamma_0u^{J-1}(t) + \gamma_1u^J(t) + \gamma_2v^J(t)] - iVv^J(t). \quad (2.55)$$

Ahora, teniendo en cuenta la discretización en el dominio interior dada por (2.35), en el caso $j = J - 1$, tenemos que

$$v^{J-1}(t) = \frac{d}{dt}u^{J-1}(t) = m_1u^{J-2}(t) + m_2u^{J-1}(t) + m_1u^J(t), \quad (2.56)$$

con m_1, m_2 dados por (2.36). Sustituyendo ahora la expresión (2.56) en (2.55), tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2} [m_1u^{J-2}(t) + m_2u^{J-1}(t) + m_1u^J(t)] - \frac{2i}{h^2}v^J(t) + \\ &\frac{2i}{h} [\gamma_0u^{J-1}(t) + \gamma_1u^J(t) + \gamma_2v^J(t)] - iVv^J(t). \end{aligned}$$

Operando y juntando términos en la expresión anterior se llega a que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2}m_1u^{J-2}(t) + \frac{2i}{h^2}m_2u^{J-1}(t) + \frac{2i}{h^2}m_1u^J(t) - \frac{2i}{h^2}v^J(t) + \\ &\frac{2i}{h}\gamma_0u^{J-1}(t) + \frac{2i}{h}\gamma_1u^J(t) + \frac{2i}{h}\gamma_2v^J(t) - iVv^J(t), \end{aligned}$$

y por tanto,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2}m_1u^{J-2}(t) + \left[\frac{2i}{h^2}m_2 + \frac{2i}{h}\gamma_0 \right] u^{J-1}(t) \\ &\left[\frac{2i}{h^2}m_1 + \frac{2i}{h}\gamma_1 \right] u^J(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} + \frac{2i}{h}\gamma_2 - iV \right] v^J(t). \end{aligned}$$

En consecuencia, obtenemos la siguiente aproximación para $\frac{d}{dt}v^J(t)$:

$$\frac{d}{dt}v^J(t) \approx \delta_3u^{J-2} + \delta_2u^{J-1} + \delta_1u^J + \delta_0v^J, \quad (2.57)$$

con

$$\begin{aligned}
 \delta_0 &= -\frac{2i}{h^2} + \frac{-hi(\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V) - 2i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)}{h} - iV, \\
 \delta_1 &= \frac{2i}{h^2}m_1 \\
 &- \frac{2(-2i - iVh^2)(\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V) - 4ih(\eta_1\eta_2\eta_3 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3)V)}{h^3}, \\
 \delta_2 &= \frac{2i}{h^2}m_2 - 2\left(\frac{\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + V}{h^3}\right), \\
 \delta_3 &= \frac{2i}{h^2}m_1,
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

donde se ha tenido en cuenta la expresión (2.53) y m_1, m_2 dados por (2.36). Razonando de manera análoga para la frontera izquierda, y usando la notación

$$v^0(t) = \frac{d}{dt}u^0(t). \tag{2.59}$$

se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{d}{dt}v^0(t) \approx \delta_3u^2 + \delta_2u^1 + \delta_1u^0 + \delta_0v^0. \tag{2.60}$$

Juntando las expresiones (2.57), (2.60) y (2.35), obtenemos el sistema diferencial de primer orden

$$U'(t) = M(h)U(t)$$

con $U(t) = [v^0(t), u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t), v^J(t)]^T$ y con matriz

$$M = \begin{bmatrix}
 \delta_0 & \delta_1 & \delta_2 & \delta_3 & 0 & \dots & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \dots & 0 \\
 \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
 0 & \dots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 0 & \dots & 0 & \delta_3 & \delta_2 & \delta_1 & \delta_0
 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+3) \times (J+3)},$$

donde los coeficientes δ_j , para $j = 0, \dots, 3$ son los que acabamos de obtener y que dependen de los nodos η_j , $j = 1, 2, 3$ de la condición de frontera absorbente.

Igual que hicimos en el caso de las CFA(1,0), veamos cuáles son los coeficientes asociados a la frontera del problema semidiscreto en espacio para la CFA(1,1) en el caso particular en el que el potencial de la ecuación es nulo fuera del dominio interior, es decir $V = 0$, y cuando los nodos η_i , $i = 1, 2, 3$ de los que dependen las condiciones de frontera absorbentes, tengan todos el mismo valor (en el caso de la CFA(1,1) $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = b$). En este caso particular, los coeficientes son

$$\begin{aligned}\delta_{0,d} &= -\frac{i}{h^2} + \frac{-3ihb^2 - 6ib}{h}, \\ \delta_{1,d} &= \frac{-2i}{h^4} + \frac{6b^2 + 2hb^3}{h^2}, \\ \delta_{2,d} &= \frac{4}{h^4} - \frac{6b^2}{h^3}, \\ \delta_{3,d} &= \frac{-2}{h^4}.\end{aligned}$$

Discretización espacial de CFA(2,1)

Para terminar esta sección, vamos a proponer una discretización espacial de la condición de frontera CFA(2,1). Consideraremos el caso de la frontera derecha, siendo el razonamiento para la frontera izquierda análogo.

Recordemos que la condición de frontera absorbente CFA(2,1), en el caso de la frontera derecha, viene dada por la expresión (2.22), es decir,

$$\beta_{0,d}\partial_x u(x_d, t) + \beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d}\partial_t^2 u(x_d, t) = 0,$$

donde los coeficientes $\beta_{j,d}$ vienen dados por (2.23). Si despejamos ahora el término de la derivada parcial, obtenemos

$$\partial_x u(x_d, t) = -\frac{1}{\beta_{0,d}} [\beta_{1,d}\partial_{xt}u(x_d, t) + \beta_{2,d}u(x_d, t) + \beta_{3,d}\partial_t u(x_d, t) + \beta_{4,d}\partial_t^2 u(x_d, t)]. \quad (2.61)$$

Usando la aproximación (2.37) se llega a que

$$\frac{d}{dt}u^J(t) = i\partial_x^2 u(x^J, t) - iVu^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} [u^{J-1}(t) - u^J(t) + h\partial_x u(x^J, t)] - iVu^J(t). \quad (2.62)$$

Puesto que $x^J = x_d$, sustituyendo en la expresión (2.62) el valor de $\partial_x u(x^J, t)$ que viene determinado en (2.61), tenemos

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}u^J(t) \\ &\quad - \frac{2i}{h\beta_{0,d}} \left[\beta_{1,d}\partial_{xt}u^J(t) + \beta_{2,d}u^J(t) + \beta_{3,d}\frac{d}{dt}u^J(t) + \beta_{4,d}\frac{d^2}{dt^2}u^J(t) \right] - iVu^J(t).\end{aligned}$$

Denotando

$$v(x, t) = \partial_t u(x, t) = \frac{d}{dt}u(x, t) \quad (2.63)$$

la expresión anterior se transforma en

$$\begin{aligned}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2}u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}u^J(t) \\ &\quad - \frac{2i}{h\beta_{0,d}} \left[\beta_{1,d}\partial_x v^J(t) + \beta_{2,d}u^J(t) + \beta_{3,d}v^J(t) + \beta_{4,d}\frac{d}{dt}v^J(t) \right] - iVu^J(t).\end{aligned}$$

Operando y juntando términos en la expresión anterior se llega a

$$v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2} u^J(t) - \frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}} \partial_x v^J(t) - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} u^J(t) - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} v^J(t) - \frac{2i\beta_{4,d}}{h\beta_{0,d}} \frac{d}{dt} v^J(t) - iV u^J(t),$$

y por tanto

$$v^J(t) \left[1 + \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] \approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] u^J(t) - \frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}} \partial_x v^J(t) - \frac{2i\beta_{4,d}}{h\beta_{0,d}} \frac{d}{dt} v^J(t).$$

Si despejamos en la expresión anterior el término $\partial_x v^J(t)$ llegamos a que

$$\frac{2i\beta_{1,d}}{h\beta_{0,d}} \partial_x v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} u^{J-1}(t) + \left[-\frac{2i}{h^2} - \frac{2i\beta_{2,d}}{h\beta_{0,d}} - iV \right] u^J(t) + \left[-1 - \frac{2i\beta_{3,d}}{h\beta_{0,d}} \right] v^J(t) - \frac{2i\beta_{4,d}}{h\beta_{0,d}} \frac{d}{dt} v^J(t)$$

Y operando, se llega a

$$\partial_x v^J(t) \approx \gamma_0 u^{J-1}(t) + \gamma_1 u^J(t) + \gamma_2 v^J(t) + \gamma_3 \frac{d}{dt} v^J(t), \quad (2.64)$$

donde los coeficientes γ_j vienen determinados en función de los η_j , $j = 1, 2, 3, 4$, por

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \frac{\eta_1\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2\eta_4 + \eta_1\eta_3\eta_4 + \eta_2\eta_3\eta_4 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)V}{h^2(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)}, \\ \gamma_1 &= -\frac{2h[\eta_1\eta_2\eta_3\eta_4 + (\eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + \eta_1\eta_4 + \eta_2\eta_3 + \eta_2\eta_4 + \eta_3\eta_4)V + V^2]}{2h(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)} \\ &\quad - \frac{(2 + Vh^2)[\eta_1\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2\eta_4 + \eta_1\eta_3\eta_4 + \eta_2\eta_3\eta_4 + (\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)V]}{2h(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)}, \quad (2.65) \\ \gamma_2 &= -\frac{h(\eta_1\eta_2\eta_3 + \eta_1\eta_2\eta_4 + \eta_1\eta_3\eta_4 + \eta_2\eta_3\eta_4) + h(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)V}{2i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)} \\ &\quad - \frac{2\eta_1\eta_2\eta_3\eta_4 + (\eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3 + \eta_1\eta_4 + \eta_2\eta_3 + \eta_2\eta_4 + \eta_3\eta_4) + 4V}{2i(\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4)}. \\ \gamma_3 &= \frac{1}{\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 + \eta_4}. \end{aligned}$$

Para proponer una aproximación a $\frac{d}{dt} v^J(t)$, derivando respecto de t en la ecuación (2.33) y utilizando una aproximación para $\partial_x^2 v(x^J, t)$ similar a la dada en (2.37) para $\partial_x^2 u(x^J, t)$, tenemos

$$\frac{d}{dt} v^J(t) = i\partial_x^2 v(x^J, t) - iV v^J(t) \approx \frac{2i}{h^2} [v^{J-1}(t) - v^J(t) + h\partial_x v(x^J, t)] - iV v^J(t). \quad (2.66)$$

Puesto que $x^J = x_d$, sustituyendo en la expresión (2.66) el valor de $\partial_x v(x^J, t)$ que viene determinado en (2.64), tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2}v^{J-1}(t) - \frac{2i}{h^2}v^J(t) + \\ &\frac{2i}{h} \left[\gamma_0 u^{J-1}(t) + \gamma_1 u^J(t) + \gamma_2 v^J(t) + \gamma_3 \frac{d}{dt}v^J(t) \right] - iVv^J(t). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Ahora, teniendo en cuenta la discretización en el dominio interior dada por (2.35), en el caso $j = J - 1$, tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}v^J(t) &\approx \frac{2i}{h^2} [m_1 u^{J-2}(t) + m_2 u^{J-1}(t) + m_1 u^J(t)] - \frac{2i}{h^2}v^J(t) \\ &+ \frac{2i}{h} \left[\gamma_0 u^{J-1}(t) + \gamma_1 u^J(t) + \gamma_2 v^J(t) + \gamma_3 \frac{d}{dt}v^J(t) \right] - iVv^J(t). \end{aligned}$$

Operando en la expresión anterior se llega a

$$\frac{d}{dt}v^J(t) \approx \delta_3 u^{J-2} + \delta_2 u^{J-1} + \delta_1 u^J + \delta_0 v^J, \quad (2.68)$$

donde

$$\begin{aligned} \delta_0 &= \frac{-2i + 2ih\gamma_2 - ih^2V}{h(h - 2i\gamma_3)}, \\ \delta_1 &= \frac{2i(i + h^3\gamma_1)}{h^3(h - 2i\gamma_3)}, \\ \delta_2 &= \frac{2i(-2i - iVh^2 + h^3\gamma_0)}{h^3(h - 2i\gamma_3)}, \\ \delta_3 &= \frac{-2}{h^3(h - 2i\gamma_3)}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

donde los coeficientes γ_j vienen determinados por la expresión (2.65). Razonando de manera similar para la frontera izquierda, y usando la notación

$$v^0(t) = \frac{d}{dt}u^0(t),$$

se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{d}{dt}v^0(t) \approx \delta_3 u^2 + \delta_2 u^1 + \delta_1 u^0 + \delta_0 v^0, \quad (2.70)$$

donde los valores de los coeficientes δ_j vienen dados por (2.69). Juntando las expresiones (2.68), (2.70) y (2.35), obtenemos el sistema diferencial de primer orden

$$U'(t) = M(h)U(t)$$

con $U(t) = [v^0(t), u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t), v^J(t)]^T$ y con matriz

$$M = \begin{bmatrix} \delta_0 & \delta_1 & \delta_2 & \delta_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & \delta_3 & \delta_2 & \delta_1 & \delta_0 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+3) \times (J+3)},$$

donde los coeficientes δ_j , para $j = 0, \dots, 3$ son los que acabamos de obtener y que dependen de los nodos η_j , $j = 1, 2, 3, 4$ de la condición de frontera absorbente.

Igual que hicimos en el caso de la CFA(1,0) y CFA(1,1), veamos cuáles son los coeficientes asociados a la frontera del problema semidiscreto en espacio para la CFA(2,1) en el caso particular en el que el potencial de la ecuación es nulo fuera del dominio interior, es decir $V = 0$, y cuando los nodos η_i , $i = 1, 2, 3, 4$ de los que dependen las condiciones de frontera absorbentes, tengan todos el mismo valor (en el caso de la CFA(2,1) $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_4 = b$). En este caso particular, los coeficientes son

$$\begin{aligned} \delta_0 &= \frac{-4ib - h(2b^3h + b^4 + 3b^2)}{h(2bh - i)}, \\ \delta_1 &= \frac{i(4bi - b^4h^3 - 4b^3h^2)}{h^3(2bh - i)}, \\ \delta_2 &= \frac{4bi(-2i + b^2h)}{h^3(2bh - i)}, \\ \delta_3 &= \frac{-4b}{h^3(2bh - i)}. \end{aligned}$$

2.2. Condiciones frontera absorbentes semidiscretas

En esta sección vamos a obtener condiciones de frontera absorbentes para una discretización espacial mediante diferencias finitas de la ecuación lineal de Schrödinger. A este tipo de condiciones de frontera las llamaremos condiciones de frontera semidiscretas en espacio. Al igual que hicimos en la sección anterior, vamos a considerar el caso en el que el potencial es constante. Es decir,

$$\partial_t u = i\partial_x^2 u - iVu, \quad x \in [x_i, x_d], \quad t > 0, \quad (2.71)$$

Vamos a considerar la misma discretización espacial en el dominio interior que propusimos en la sección anterior. Es decir, el esquema de diferencias finitas

$$\frac{d}{dt} u^j = i \left(\frac{u^{j+1} - 2u^j + u^{j-1}}{h^2} \right) - iVu^j, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad t \geq 0. \quad (2.72)$$

En la sección 1.3 del capítulo precedente obtuvimos las condiciones de frontera transparentes (1.26) y (1.27) para esta discretización. Particularizando a cuando el potencial es constante e igual a V , esta condición de frontera transparente semidiscreta viene dada, en el caso de la condición de frontera derecha (1.26) por

$$\hat{u}^{J-1}(s) = \left[1 - \frac{h^2}{2}(is - V) - \sqrt{\frac{h^2}{2}(is - V) \left(\frac{h^2}{2}(is - V) - 2 \right)} \right] \hat{u}^J(s). \quad (2.73)$$

Denotemos

$$r(\eta, h) = 1 - \frac{h^2}{2}\eta - \sqrt{\frac{h^2}{2}\eta \left(\frac{h^2}{2}\eta - 2 \right)}, \quad (2.74)$$

con $\eta = is - V$. Luego, la condición de frontera transparente (2.73) se puede expresar como

$$\hat{u}^{J-1}(s) = r(\eta, h)\hat{u}^J(s). \quad (2.75)$$

De la misma forma, para la frontera izquierda, la condición de frontera transparente semidiscreta (1.27), se puede escribir como

$$\hat{u}^1(s) = r(\eta, h)\hat{u}^0(s). \quad (2.76)$$

Puesto que la condición de frontera transparente (2.75) es no local, se considerará el uso de condiciones de frontera absorbentes locales. Nos centraremos en la frontera derecha en x_d , pues el razonamiento para la frontera izquierda es totalmente similar. Para ello, aproximaremos la expresión $r(\eta, h)$ dada por (2.74) mediante funciones racionales interpolatorias $q(\eta)$, es decir,

$$r(\eta, h) \approx q(\eta), \quad (2.77)$$

donde $q(\eta)$ es una función racional determinada por

$$q(\eta) = \frac{p_1(\eta)}{p_2(\eta)}$$

donde $p_1(\eta)$ y $p_2(\eta)$ son dos polinomios relativamente primos de grados j_1 y j_2 , respectivamente. A las condiciones de frontera absorbentes obtenidas al usar la aproximación (2.77) en las condiciones de frontera transparentes (2.75) y (2.76) las llamaremos CFAS(j_1, j_2) y al número natural $j_1 + j_2 + 1$ orden de absorción.

A continuación, vamos a obtener las condiciones de frontera absorbentes para los mismos órdenes que consideramos en la sección previa al obtener las condiciones de frontera absorbentes para el problema continuo. Es decir, vamos a obtener: CFAS(1, 0), CFAS(1, 1) y CFAS(2, 1). Por simplificar la notación y puesto que los experimentos numéricos los vamos a hacer para el caso de potencial nulo, para obtener los coeficientes de las condiciones de frontera absorbentes, vamos a considerar el problema semidiscreto en espacio (2.72) para $V = 0$, es decir,

$$\frac{d}{dt}u^j(t) = i \frac{u^{j-1}(t) - 2u^j(t) + u^{j+1}(t)}{h^2}, \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad (2.78)$$

que, usando la notación (2.36) se puede escribir como

$$\frac{d}{dt}u^j(t) = m_1 u^{j-1}(t) + m_2 u^j(t) + m_1 u^{j+1}(t), \quad 1 \leq j \leq J-1, \quad (2.79)$$

con

$$m_1 = \frac{i}{h^2}, \quad m_2 = \frac{-2i}{h^2}. \quad (2.80)$$

Ésta es la discretización en los nodos del dominio interior. A continuación vamos a deducir varias condiciones de frontera semidiscretas y a usarlas para dar una aproximación a $\frac{d}{dt}u^j(t)$ cuando $j = 0$ y $j = J$, que se corresponden con los extremos del intervalo $[x_i, x_d]$, es decir, $x_i = x_0$ y $x_d = x_J$.

Obtención de la condición de frontera absorbente CFAS(1,0).

En primer lugar, vamos a obtener en el siguiente teorema la condición de frontera absorbente semidiscreta CFAS(1,0).

Teorema 2.2.1. Las condiciones de frontera absorbentes CFAS(1,0) para el problema semidiscreto en espacio (2.78) vienen dadas por

$$u^1(t) = \alpha_0 u^0(t) + i\alpha_1 \frac{du^0}{dt}(t), \quad (2.81)$$

$$u^{J-1}(t) = \alpha_0 u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t), \quad (2.82)$$

donde los coeficientes α_0 y α_1 dependen de los nodos de interpolación η_1 y η_2 asociados a la condición de frontera. En el caso particular en el que dichos nodos sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_0$, los coeficientes de la CFAS(1,0) vienen dados por

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{-4 + \eta_0 h^2 + c}{-4 + \eta_0 h^2}, \\ \alpha_1 &= \frac{-(\eta_0^2 h^4 - 2c + \eta_0 h^2(-4 + c))}{2\eta_0(-4 + \eta_0 h^2)} \end{aligned} \quad (2.83)$$

con

$$c = \sqrt{\eta_0 h^2(-4 + \eta_0 h^2)}. \quad (2.84)$$

Demostración. Vamos a deducir la CFAS(1,0) derecha (2.82), siendo análogo el razonamiento para deducir la CFAS(1,0) izquierda dada por (2.81).

Consideramos en la aproximación (2.77) el polinomio

$$q(\eta) = \alpha_0 + \alpha_1 \eta \quad (2.85)$$

que interpola a $r(\eta, h)$ en los nodos η_1 , η_2 y usemos dicha aproximación en la condición de frontera transparente semidiscreta derecha (2.75). Tenemos entonces

$$\hat{u}^{J-1}(s) = (\alpha_0 + \alpha_1 \eta) \hat{u}^J(s).$$

Teniendo en cuenta que $\eta = is$,

$$\hat{u}^{J-1}(s) = (\alpha_0 + \alpha_1 is) \hat{u}^J(s).$$

Tomando ahora transformada inversa de Laplace, obtenemos

$$u^{J-1}(t) = \alpha_0 u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t),$$

es decir, hemos deducido la CFAS(1,0) dada por (2.82).

Nótese que los coeficientes de la CFAS(1,0) dependen de los nodos η_1, η_2 . En el caso particular de que dichos nodos sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_0$, el polinomio $q(\eta)$ es en realidad el polinomio de Taylor de grado 1 de la función $r(\eta, h)$ en el punto $\eta = \eta_0$ y sus coeficientes son los dado por (2.83). □

Problema semidiscreto para CFAS(1,0)

Una vez obtenidas las CFAS(1,0), vamos a utilizarlas para que, junto con la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtengamos un problema semidiscreto en espacio.

Despejando $\frac{du^0}{dt}(t)$ y $\frac{du^J}{dt}(t)$ en las CFAS(1,0) (2.81)-(2.82), tenemos

$$\begin{aligned}\frac{du^0}{dt}(t) &= \gamma_0 u^0 + \gamma_1 u^1, \\ \frac{du^J}{dt}(t) &= \gamma_0 u^J + \gamma_1 u^{J-1}\end{aligned}$$

con

$$\gamma_0 = \frac{i\alpha_0}{\alpha_1}, \quad \gamma_1 = \frac{-i}{\alpha_1}.$$

Teniendo además en cuenta la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtenemos el sistema diferencial de primer orden

$$U'(t) = M(h)U(t) \tag{2.86}$$

con $U(t) = [u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t)]$ y con matriz

$$M = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \gamma_1 & \gamma_0 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+1) \times (J+1)},$$

donde, m_1, m_2 vienen dados por (2.80), y los coeficientes γ_0, γ_1 , en el caso en el que los nodos asociados a la condición de frontera absorbente sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_0$ viene dados por

$$\gamma_0 = \frac{2i\eta_0(-4 + c + \eta_0 h^2)}{2c - (-4 + c)\eta_0 h^2 - \eta_0^2 h^4} \tag{2.87}$$

$$\gamma_1 = \frac{2i\eta_0(-4 + \eta_0 h^2)}{\eta_0 h^2(-4 + \eta_0 h^2) + c(-2 + \eta_0 h^2)}, \tag{2.88}$$

donde c viene expresado por (2.84).

Obtención de la condición de frontera absorbente CFAS(1,1).

Vamos a deducir la CFAS(1,1) derecha, siendo análogo el razonamiento para deducir la CFAS(1,1) izquierda.

Consideramos en la aproximación (2.77) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta}{1 + \alpha_2\eta} \tag{2.89}$$

que interpola a $r(\eta, h)$ en los nodos η_1, η_2 y η_3 y usemos dicha aproximación en la condición de frontera transparente semidiscreta derecha (2.75). Tenemos entonces

$$\hat{u}^{J-1}(s) = \left(\frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta}{1 + \alpha_2\eta} \right) \hat{u}^J(s).$$

Realizando cálculos llegamos a que

$$(1 + \alpha_2\eta)\hat{u}^{J-1}(s) = (\alpha_0 + \alpha_1\eta) \hat{u}^J(s)$$

es decir,

$$\hat{u}^{J-1}(s) + \alpha_2\eta\hat{u}^{J-1}(s) = \alpha_0\hat{u}^J(s) + \alpha_1\eta\hat{u}^J(s).$$

Teniendo en cuenta que $\eta = is$, la igualdad anterior se reescribe

$$\hat{u}^{J-1}(s) + \alpha_2is\hat{u}^{J-1}(s) = \alpha_0\hat{u}^J(s) + \alpha_1is\hat{u}^J(s).$$

Tomando ahora transformada inversa de Laplace, obtenemos la condición de frontera CFAS(1,1) para la frontera derecha $x_d = x^J$

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_2 \frac{d}{dt} u^{J-1}(t) = \alpha_0 u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t). \tag{2.90}$$

Nótese que los coeficientes α_j de la CFAS(1,1) dependen de los nodos η_1, η_2 y η_3 . En el caso particular de que dichos nodos sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_0$, la función racional $q(\eta)$ es en realidad el aproximante de Padé(1,1) de la función $r(\eta, h)$ en el punto $\eta = \eta_0$.

Problema semidiscreto para CFAS(1,1)

Una vez obtenidas las CFAS(1,1), vamos a utilizarlas para que, junto con la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtengamos un problema semidiscreto en espacio.

Con el objetivo de obtener a partir de la CFAS(1,1) dada por (2.90) una expresión práctica que aproxime $\frac{d}{dt} u^J(t)$, vamos a tener en cuenta la expresión (2.79) para $j = J - 1$. De esta manera, la expresión anterior queda

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_2(m_1u^{J-2} + m_2u^{J-1} + m_1u^J) = \alpha_0u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t),$$

y efectuando operaciones

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_2 m_1 u^{J-2} + i\alpha_2 m_2 u^{J-1} + i\alpha_2 m_1 u^J = \alpha_0 u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t).$$

Operando y despejando $\frac{du^J}{dt}(t)$, tenemos

$$\frac{du^J}{dt}(t) = \gamma_0 u^J + \gamma_1 u^{J-1} + \gamma_2 u^{J-2},$$

con

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \frac{i(\alpha_2 + \alpha_0 h^2)}{\alpha_1 h^2}, \\ \gamma_1 &= \frac{-i(2\alpha_2 + h^2)}{\alpha_1 h^2}, \\ \gamma_2 &= \frac{i\alpha_2}{\alpha_1 h^2}.\end{aligned}$$

Un razonamiento análogo para la frontera izquierda, nos lleva a obtener

$$\frac{du^0}{dt}(t) = \gamma_0 u^0 + \gamma_1 u^1 + \gamma_2 u^2.$$

Teniendo además en cuenta la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtenemos el sistema diferencial de primer orden

$$U'(t) = M(h)U(t) \tag{2.91}$$

con $U(t) = [u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t)]$ y con matriz

$$M = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \gamma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 \\ 0 & \cdots & 0 & \gamma_2 & \gamma_1 & \gamma_0 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+1) \times (J+1)},$$

donde, m_1 y m_2 vienen dados por (2.80), y los coeficientes γ_0 , γ_1 y γ_2 , en el caso en el que los nodos asociados a la condición de frontera absorbente sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_0$ vienen dados por

$$\gamma_0 = \frac{i(2 - 3\eta_0 h^2 + 3c)}{2h^2}, \tag{2.92}$$

$$\gamma_1 = \frac{i(-4 - 6c + 3\eta_0 h^2(4 - \eta_0 h^2 + c))}{2h^2}, \tag{2.93}$$

$$\gamma_2 = -\frac{2i}{h^2(-2 + 3c + \eta_0 h^2(9 - 4c + \eta_0 h^2(-6 + \eta_0 h^2 + c)))}, \tag{2.94}$$

donde c viene determinado por la expresión

$$c = \sqrt{\eta_0 h^2(-4 + \eta_0 h^2)}. \tag{2.95}$$

Obtención de la condición de frontera absorbente CFAS(2,1)

A continuación vamos a obtener la condición de frontera absorbente semidiscreta CFAS(2,1). Realizaremos el razonamiento para la frontera derecha, siendo análogo el razonamiento para deducir la CFAS(2,1) izquierda.

Consideramos en la aproximación (2.77) la función racional

$$q(\eta) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta + \alpha_2\eta^2}{1 + \alpha_3\eta} \quad (2.96)$$

que interpola a $r(\eta, h)$ en los nodos η_1, η_2, η_3 y η_4 y usemos dicha aproximación en la condición de frontera transparente semidiscreta derecha (2.75). Tenemos entonces

$$\hat{u}^{J-1}(s) = \left(\frac{\alpha_0 + \alpha_1\eta + \alpha_2\eta^2}{1 + \alpha_3\eta} \right) \hat{u}^J(s).$$

Realizando cálculos llegamos a que

$$(1 + \alpha_3\eta)\hat{u}^{J-1}(s) = (\alpha_0 + \alpha_1\eta + \alpha_2\eta^2) \hat{u}^J(s),$$

es decir,

$$\hat{u}^{J-1}(s) + \alpha_3\eta\hat{u}^{J-1}(s) = \alpha_0\hat{u}^J(s) + \alpha_1\eta\hat{u}^J(s) + \alpha_2\eta^2\hat{u}^J(s).$$

Teniendo en cuenta que $\eta = is$, la igualdad anterior se reescribe

$$\hat{u}^{J-1}(s) + \alpha_3is\hat{u}^{J-1}(s) = \alpha_0\hat{u}^J(s) + \alpha_1is\hat{u}^J(s) - \alpha_2s^2\hat{u}^J(s).$$

Tomando ahora transformada inversa de Laplace, obtenemos la CFAS(2,1) para la frontera derecha

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_3\frac{d}{dt}u^{J-1}(t) = \alpha_0u^J(t) + i\alpha_1\frac{du^J}{dt}(t) - \alpha_2\frac{d^2}{dt^2}u^J(t). \quad (2.97)$$

Nótese que los coeficientes α_j de la CFAS(2,1) dependen de los nodos η_1, η_2, η_3 y η_4 . En el caso particular de que dichos nodos sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_4 = \eta_0$, la función racional $q(\eta)$ es en realidad el aproximante de Padé(2,1) de la función $r(\eta, h)$ en el punto $\eta = \eta_0$.

Problema semidiscreto para CFAS(2,1)

Una vez obtenidas las CFAS(2,1), vamos a utilizarlas para que, junto con la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtengamos un problema semidiscreto en espacio.

Con el objetivo de, a partir de la CFAS(2,1) dada por (2.97) y de la discretización espacial en el dominio interior, obtener un problema semidiscreto en espacio, vamos a tener en cuenta la expresión (2.79) para $j = J - 1$. De esta manera, la expresión (2.97) queda

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_3(m_1u^{J-2}(t) + m_2u^{J-1}(t) + m_1u^J(t)) = \alpha_0u^J(t) + i\alpha_1\frac{du^J}{dt}(t) - \alpha_2\frac{d^2}{dt^2}u^J(t),$$

y efectuando operaciones

$$u^{J-1}(t) + i\alpha_3 m_1 u^{J-2}(t) + i\alpha_3 m_2 u^{J-1}(t) + i\alpha_3 m_1 u^J(t) = \alpha_0 u^J(t) + i\alpha_1 \frac{du^J}{dt}(t) - \alpha_2 \frac{d^2}{dt^2} u^J(t).$$

Si usamos la notación $v^J(t) = \frac{du^J}{dt}$ y operamos, se tiene

$$v^J(t) - \frac{i\alpha_3}{\alpha_1 h^2} u^{J-2}(t) + \frac{i(2\alpha_3 + h^2)}{\alpha_1 h^2} u^{J-1}(t) - \frac{i(\alpha_3 + \alpha_0 h^2)}{\alpha_1 h^2} u^J(t) + \frac{i\alpha_2}{\alpha_1} \frac{d}{dt} v^J(t) = 0.$$

Despejado ahora $\frac{dv^J}{dt}(t)$, tenemos

$$\frac{dv^J}{dt}(t) = \gamma_0 v^J + \gamma_1 u^J + \gamma_2 u^{J-1} + \gamma_3 u^{J-2},$$

con

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \frac{i\alpha_1}{\alpha_2}, \\ \gamma_1 &= \frac{\alpha_0 h^2 + \alpha_3}{\alpha_2 h^2}, \\ \gamma_2 &= \frac{-(h^2 + 2\alpha_3)}{\alpha_2 h^2}, \\ \gamma_3 &= \frac{\alpha_3}{\alpha_2 h^2}. \end{aligned} \tag{2.98}$$

Un razonamiento análogo para la frontera izquierda, nos lleva a deducir

$$\frac{dv^0}{dt}(t) = \gamma_0 v^0 + \gamma_1 u^0 + \gamma_2 u^1 + \gamma_3 u^2.$$

Teniendo además en cuenta la discretización espacial en el dominio interior dada por (2.79), obtenemos el sistema diferencial de primer orden

$$U'(t) = M(h)U(t) \tag{2.99}$$

con $U(t) = [v^0(t), u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t), v^J(t)]$ y con matriz

$$M = \begin{bmatrix} \gamma_0 & \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & m_1 & m_2 & m_1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & \gamma_3 & \gamma_2 & \gamma_1 & \gamma_0 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(J+3) \times (J+3)},$$

donde, m_1 y m_2 vienen dados por (2.80), y los coeficientes γ_0 , γ_1 , γ_2 y γ_3 , en el caso en el que los nodos asociados a la condición de frontera absorbente sean iguales $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \eta_4 = \eta_0$

vienen dados por

$$\gamma_0 = -2i \left(\eta_0 - \frac{c}{h^2} \right), \quad (2.100)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{h^4} (2c + \eta_0 h^2 (-8 + 3\eta_0 h^2 - 3c)), \quad (2.101)$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{h^4} (-4c + 2\eta_0 h^2 (-4 + \eta_0 h^2) (-2 + \eta_0 h^2 - c)), \quad (2.102)$$

$$\gamma_3 = -\frac{2\eta_0 (-4 + \eta_0 h^2) (-2 + \eta_0 h^2)}{\eta_0^3 h^8 + 2h^2 c + \eta_0^2 h^6 (-6 + c) - 4\eta_0 h^4 (-2 + c)}, \quad (2.103)$$

donde

$$c = \sqrt{\eta_0 h^2 (-4 + \eta_0 h^2)}. \quad (2.104)$$

Como acabamos de ver, las distintas condiciones de frontera absorbentes dependen de los nodos η_j en los que la función racional $q(\eta)$ interpola a la función $r(\eta, h)$. Vamos a explicar a continuación cómo elegir el valor de dichos nodos de manera adecuada para obtener una buena absorción de la solución cuando llega a la frontera en el caso de una onda plana de la forma

$$\{w^j(t)\}_{j \in \mathbb{Z}} = \{\exp(i(\eta j - \omega(\eta)t))\}_{j \in \mathbb{Z}}. \quad (2.105)$$

Lo primero que observamos es que para que la expresión (2.105) sea solución de la ecuación semidiscreta (2.78) se tiene que verificar

$$\frac{d}{dt} \left(e^{i(\eta j - \omega(\eta)t)} \right) = \frac{i}{h^2} \left(e^{i(\eta(j-1) - \omega(\eta)t)} \right) - \frac{2i}{h^2} \left(e^{i(\eta j - \omega(\eta)t)} \right) + \frac{i}{h^2} \left(e^{i(\eta(j+1) - \omega(\eta)t)} \right).$$

Operando en la igualdad anterior tenemos

$$-i\omega(\eta) \left(e^{i(\eta j - \omega(\eta)t)} \right) = e^{i(\eta j - \omega(\eta)t)} \left(\frac{i}{h^2} e^{-i\eta} - \frac{2i}{h^2} + \frac{i}{h^2} e^{i\eta} \right) \quad (2.106)$$

Teniendo en cuenta que

$$\cos(\eta) = \frac{e^{i\eta} + e^{-i\eta}}{2}$$

de la expresión (2.106) se deduce que $\omega(\eta)$ debe verificar

$$\omega(\eta) = \frac{2}{h^2} (1 - \cos(\eta)), \quad (2.107)$$

que se conoce como relación de dispersión del problema semidiscreto en espacio (2.78) para la ecuación lineal de Schrödinger.

Para absorber la onda (2.105) se deben elegir los nodos de las condiciones de frontera absorbentes obtenidas con la aproximación (2.77) para que $r(\eta, h) - q(\eta)$ sea pequeño cuando la solución es (2.105). La idea para elegir los nodos adecuados es la siguiente. Puesto que la transformada de Laplace $\mathcal{L}(e^{-i\omega(\eta)t}) = 1/(s + i\omega(\eta))$ se hace 'grande' cuando el denominador se aproxima a cero, nos interesa que la aproximación (2.77) sea exacta cuando

$$s = -i\omega(\eta) = \frac{-2i}{h^2}(1 - \cos(\eta)),$$

es decir, cuando

$$\eta = is = \frac{2}{h^2}(1 - \cos(\eta)).$$

Por tanto, para absorber la onda plana (2.105) una buena elección sería considerar todos los nodos η_j de los que dependen las condiciones de frontera absorbentes iguales al valor

$$\eta_0 = \frac{2}{h^2}(1 - \cos(\eta)).$$

Capítulo 3

Experimentos Numéricos

En el presente capítulo, se expondrán en detalle los experimentos numéricos llevados a cabo en el marco de este Trabajo de Fin de Máster. El primer objetivo de este capítulo es proporcionar una visualización más clara y comprensiva de la parte teórica abordada en el trabajo. Un segundo objetivo alcanzado con los experimentos numéricos que hemos realizado es comprender mejor el funcionamiento de las distintas condiciones de frontera absorbentes que hemos deducido en el capítulo anterior, tanto las obtenidas en la sección 2.1 para el problema continuo y que hemos denotado por CFA, como las obtenidas en la sección 2.2 para la discretización espacial mediante diferencias finitas allí considerada y que hemos denotado por CFAS.

Para nuestros experimentos numéricos consideraremos una condición inicial que sea, o bien el pulso oscilatorio de perfil gaussiano del tipo

$$u_0(x) = \exp \left[- \left(\frac{x}{\sigma} \right)^2 \right] \exp (i\tau x), \quad (3.1)$$

o bien suma de varios pulsos de este tipo.

Para esta condición inicial, es conocida la solución exacta lo que nos va a permitir medir el error que cometemos con la aproximación numérica que obtenemos con nuestro algoritmo y por tanto podremos analizar mejor el buen funcionamiento de nuestro esquema numérico. En concreto, la solución exacta en este caso viene determinada por

$$u(x, t) = \left(1 + \frac{4it}{\sigma^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp[-i(\tau^2 + V)t] \exp \left[i\tau x - \frac{(x - 2\tau t)^2}{\sigma^2 + 4it} \right]. \quad (3.2)$$

Nótese que

$$u(x, t) = \exp [i\tau(x - \tau t)] g(x - 2\tau t, t)$$

donde

$$g(x, t) = \left(1 + \frac{4it}{\sigma^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp(-iVt) \exp \left[\frac{-x^2}{\sigma^2 + 4it} \right]$$

es la solución del problema con condición inicial $\exp(-x^2/\sigma^2)$ y $|g(x, t)|$ es una onda que no viaja con el tiempo y que cuando t aumenta, se expande. Por tanto, $u(x, t)$ es el producto de una onda plana con velocidad de fase τ y un pulso que se expande y se traslada con velocidad de grupo 2τ .

Queremos integrar numéricamente el problema de valor inicial (para los experimentos numéricos vamos a considerar el caso de potencial nulo $V = 0$)

$$\partial_t u = i\partial_x^2 u, \quad x \in [0, L], \quad t > 0, \quad (3.3)$$

$$u(x, 0) = u_0 \left(x - \frac{L}{2} \right), \quad x \in [0, L] \quad (3.4)$$

donde $u_0(x)$ viene dado por (3.1) y considerando en la frontera del dominio espacial interior alguna de las condiciones de frontera absorbentes obtenidas en el capítulo 2.

Para la integración numérica de este problema de valor inicial y de frontera, vamos a usar el método de líneas. En primer lugar, consideraremos la discretización espacial para la ecuación (3.3) propuesta en el capítulo 2. Más concretamente, denotemos por $h = L/J > 0$, y por $x^j = jh$ para $j \in \{0, 1, \dots, J\}$ los nodos de una red uniforme del intervalo $[0, L]$. Denotemos además por $u^j(t)$ una aproximación a $u(x^j, t)$. La discretización espacial considerada viene dada por el esquema de diferencias finitas dado por

$$\frac{d}{dt} u^j(t) = i \frac{u^{j-1}(t) - 2u^j(t) + u^{j+1}(t)}{h^2}, \quad 1 \leq j \leq J-1. \quad (3.5)$$

Como hemos visto en el capítulo 2, al considerar esta discretización espacial en el dominio interior $[0, L]$ junto con alguna de las condiciones de frontera absorbentes del capítulo 2, obtenemos un problema semidiscreto en espacio del tipo

$$U'(t) = MU(t) \quad (3.6)$$

donde

$$U(t) = [u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t)]^T$$

y

$$M \in \mathcal{M}_{(J+1) \times (J+1)}$$

en el caso de las CFA(1,0), CFAS(1,0) y CFAS(1,1) y

$$U(t) = [v^0(t), u^0(t), u^1(t), \dots, u^{J-1}(t), u^J(t), v^J(t)]^T$$

y

$$M \in \mathcal{M}_{(J+3) \times (J+3)}$$

en el caso de las CFA(1,1), CFA(2,1) y CFAS(2,1), siendo $v^l(t) = du^l(t)/dt$ para $l = 0, J$.

Recordemos que, en todos los casos, los coeficientes de la primera y última fila de la matriz M dependen de los nodos de interpolación η_j , $j = 1, \dots, j_1 + j_2 + 1$ en los que está basada la correspondiente condición de frontera CFA(j_1, j_2) o CFAS(j_1, j_2). Como ya hemos comentado en los capítulos anteriores, la elección del valor de estos nodos va a influir en la absorción de la condición de frontera y hemos explicado en el capítulo 2 cuál es la elección óptima de los nodos para absorber una onda plana. En los experimentos numéricos que vamos a mostrar a continuación, hemos elegido todos los nodos iguales, es decir $\eta_j = b$ para $j = 1, \dots, j_1 + j_2 + 1$ y en cada experimento numérico el valor de b lo elegiremos de manera óptima para la condición inicial considerada.

Para completar la discretización del problema de valor inicial y de frontera mediante el método de líneas, ahora debemos considerar la integración en tiempo del problema semidiscreto

en espacio dado por el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (3.6). Aunque existen muchos integradores temporales, debemos darnos cuenta de que el sistema (3.6) es rígido y dicha rigidez crece cuando h , el parámetro de la discretización espacial, tiende a cero. Teniendo en cuenta esto, en este trabajo vamos a considerar como integrador temporal, en primer lugar la regla del punto medio implícita (RPMI).

Denotemos por $k = T_f/N$ a la longitud de paso del integrador en tiempo, sea $t_n = kn$ y denotemos por U_n la aproximación numérica en tiempo t_n .

La regla del punto medio implícita para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales del tipo

$$\frac{dU(t)}{dt} = F(U, t)$$

permite obtener la aproximación U_{n+1} en tiempo t_{n+1} mediante

$$U_{n+1} = U_n + kF\left(\frac{1}{2}(U_n + U_{n+1}), t_n + \frac{k}{2}\right). \quad (3.7)$$

Equivalentemente, se puede escribir también de la siguiente manera

$$Y_1 = U_n + \frac{k}{2}F(Y_1, t_f + \frac{k}{2}) \quad (3.8)$$

$$U_{n+1} = U_n + kF(Y_1, t_f + \frac{k}{2}). \quad (3.9)$$

Para la implementación es recomendable (véase [25]) resolver (3.8) para Y_1 y después calcular U_{n+1} mediante

$$U_{n+1} = 2Y_1 - U_n. \quad (3.10)$$

En nuestro caso, la función del sistema de ecuaciones diferenciales es $F(U, t) = MU$ y por tanto, (3.8) en este caso es

$$Y_1 = U_n + \frac{k}{2}MY_1 \Leftrightarrow \left(I - \frac{k}{2}M\right)Y_1 = U_n. \quad (3.11)$$

Por tanto, la implementación de la regla del punto medio implícita para integrar numéricamente (3.6) consiste en

$$\left(I - \frac{k}{2}M\right)Y_1 = U_n, \quad (3.12)$$

$$U_{n+1} = 2Y_1 - U_n \quad (3.13)$$

Es decir, en cada paso en tiempo debemos resolver un sistema de ecuaciones lineales con matriz

$$A = I - \frac{k}{2}M.$$

Nótese que la matriz no cambia con el paso en tiempo y por tanto, para resolver estos sistemas lineales con eliminación gaussiana, es importante, en cuanto al coste computacional, hacer la factorización LU de la matriz A una sola vez al principio del programa, antes de comenzar el bucle en tiempo.

La regla del punto medio implícita es un método de orden dos. En los algunos experimentos numéricos utilizaremos otro integrador numérico de orden 3. Se trata de un método Ruge-Kutta diagonalmente implícito con los elementos diagonales iguales cuyo tablero es el siguiente

$$\begin{array}{c|cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1 - \gamma & 1 - 2\gamma & \gamma \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

con $\gamma = (3 + \sqrt{3})/6$. Llamaremos a este método SDIRK3. Nótese que, al tener los elementos diagonales iguales, en la implementación hay que resolver en cada paso en tiempo dos sistemas lineales con la misma matriz: $I - k\gamma M$. Este hecho es importante para que el método sea computacionalmente más interesante.

Experimento 1

En este primer experimento vamos a resolver numéricamente el problema de valor inicial y de frontera

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u + Vu, \quad x \in [0, L], \quad 0 < t < T_f, \quad (3.14)$$

$$u(x, 0) = u_0 \left(x - \frac{L}{2} \right), \quad x \in \mathbb{R},$$

$$\text{CFA}(j_1, j_1) \text{ ó CFAS}(j_1, j_1) \text{ en } x_i = 0, x_d = L,$$

con $V = 0$ y donde $u_0(x)$ viene dado por (3.1) con

$$\sigma = 4, \quad \tau = 5, \quad L = 50, \quad T_f = 5. \quad (3.15)$$

Para la discretización en espacio utilizaremos el esquema en diferencias finitas que hemos explicado anteriormente y para la integración en tiempo utilizaremos la regla del punto medio implícita (RPMI). En primer lugar, vamos a considerar la condición de frontera absorbente continua CFA(1,0), es decir, vamos a considerar en (3.14) la condición de frontera CFA con $j_1 = 1, j_2 = 0$. Al considerar la condición de frontera CFA(1,0), la matriz de (3.6) en este caso viene dada por (2.47).

Para este experimento numérico tomaremos longitudes de paso en tiempo y espacio $k = 5 \times 10^{-4}$ y $h = 10^{-2}$. En la Figura 3.1 hemos representado el módulo de la solución numérica en cuatro instantes de tiempo distintos: $t = 0, 2, 3, 4$. Podemos observar cómo la solución viaja hacia la derecha con una velocidad aproximada de $v = 2 \cdot \tau = 2 \cdot 5 = 10$. Vemos en esta figura que la condición inicial es nula en la frontera, que en $t = 2$ la solución ya ha llegado a la frontera derecha y está siendo absorbida por la CFA(1,0), que en $t = 3$ continúa la absorción y en $t = 4$ ya solo quedan reflejos que no han podido ser absorbidos pero que son de un tamaño pequeño.

Puesto que, como ya hemos comentado, para la condición inicial considerada sabemos cuál es la solución exacta, podemos calcular el error. Hemos calculado el error L^2 discreto relativo y lo hemos representado en la Figura 3.2.

A la vista de la Figuras 3.1 y 3.2 nos fijamos en dos cuestiones:

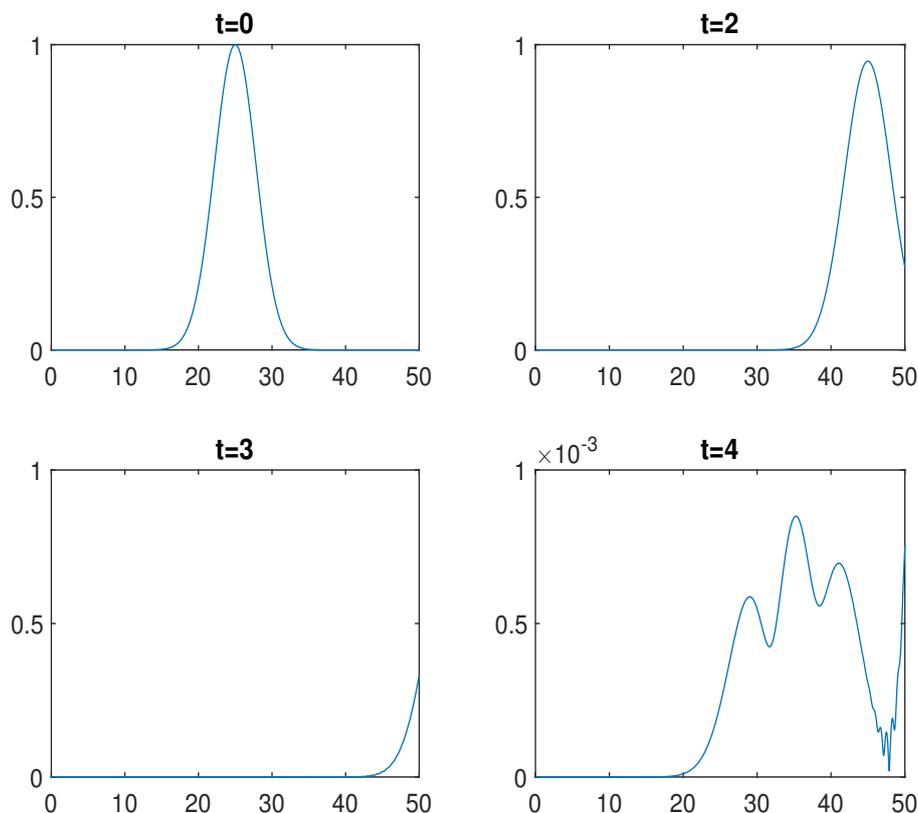


Figura 3.1: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Módulo de la solución numérica para distintos instantes de tiempo cuando se utiliza CFA(1,0) y RPMI.

- a) **Error en el dominio interior:** Hasta que la solución numérica llega a la frontera (para $t \geq 2$ aproximadamente) y comienza a ser absorbida por la CFA, lo que observamos en la Figura 3.2 es el error que se comete debido a la resolución numérica de la ecuación en el dominio interior $[0, L]$, es decir debido a la discretización espacial y temporal de la ecuación en el dominio interior.

Si observamos la Figura 3.2 vemos que en el interior el error máximo se da en torno a $t = 2$ llegando a ser aproximadamente 10^{-2} .

- b) **Absorción en la frontera:** Pasamos a estudiar ahora cómo es la absorción en la frontera con nuestra condición de frontera absorbente CFA(1,0). Tendremos en cuenta que el dominio computacional que se ha elegido es suficientemente grande para que contenga el soporte de la condición inicial.

Tanto en la Figura 3.1 como en la 3.2, vemos que para $t > 2$ la CFA(1,0) está absorbiendo la solución numérica, quedando finalmente unos pequeños reflejos que no han sido absorbidos y que tienen norma 10^{-3} aproximadamente como se ve en la Figura 3.2, lo que concuerda con la última representación de la Figura 3.1 en $t = 4$.

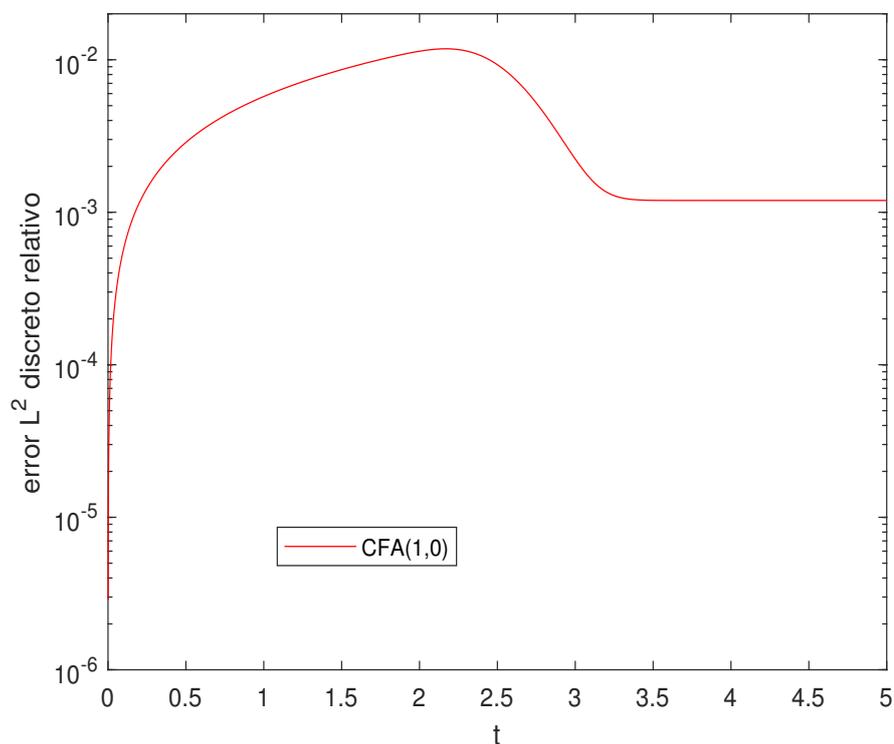


Figura 3.2: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza CFA(1, 0) y RPMI.

A continuación, vamos a estudiar con más detalle los errores debidos a la integración numérica de la ecuación en el dominio interior $[0, L]$. Separemos el caso de la discretización espacial y la integración en tiempo.

- Para la **discretización espacial** hemos usado el esquema de diferencias finitas dado por (3.5). Veamos numéricamente el orden de este esquema.

Para ello, fijamos $k = 5 \times 10^{-4}$ (un valor de k suficientemente pequeño para cerciorarnos que los errores que observamos provengan solo de la discretización espacial) y ejecutamos el programa para distintos valores de h : 4×10^{-2} , 2×10^{-2} y 10^{-2} y para cada valor de h , hemos calculado el error en norma L^2 discreta de la solución numérica en tiempo $t = 2$. Vemos los resultados en la Tabla 3.1 donde se observa el orden 2 del esquema de diferencias finitas utilizado para la discretización espacial.

- Para la **integración temporal** se ha usado la regla del punto medio implícita, que sabemos que es un método de orden 2. A continuación lo vamos a comprobar numéricamente.

Para ello, fijamos $h = 5 \times 10^{-3}$ (un valor de h suficientemente pequeño para así cerciorarnos de que los errores que observamos provengan de la integración temporal) y ejecutamos nuestro programa para varios valores de k . Vamos medir, para cada valor de k , el error local y también el error global que se comete en tiempo $t = 2$, usando norma L^2 discreta. Vemos los resultados en la Tabla 3.2 en la que se observa aproximadamente

el orden global 2 y el orden local 3 en tiempo, es decir, lo que cabría esperar con un método de orden 2 como la RPMI.

h	4.0×10^{-2}	2.0×10^{-2}	1.0×10^{-2}
error	3.83×10^{-1}	9.71×10^{-2}	2.55×10^{-2}
orden espacial		1.98	1.93

Tabla 3.1: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Orden de la discretización espacial. Resultados para $k = 2.5 \times 10^{-4}$.

k	10^{-2}	5.0×10^{-3}	2.5×10^{-3}
error local	3.15×10^{-3}	4.1×10^{-4}	5.7×10^{-5}
orden local		2.95	2.85
error global	6.22×10^{-1}	1.62×10^{-1}	4.49×10^{-2}
orden global		1.94	1.85

Tabla 3.2: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Orden de la integración temporal con la RPMI. Resultados para $h = 5.0 \times 10^{-3}$

A la vista del estudio numérico que acabamos de realizar para el experimento 1, vemos dos vías de mejorar nuestro algoritmo:

- Por un lado, en cuanto a la discretización en el dominio interior, nuestro algoritmo sería más eficiente si en lugar de un método de orden 2 como la RPMI, utilizáramos un método de orden mayor. Una buena opción es el SDIRK3 mencionado anteriormente y que tiene orden 3. Al considerar este método de mayor orden que la RPMI vamos a poder obtener unos errores de tamaño similar a los representados en la Figura 3.2 para la RPMI con $k = 5 \times 10^{-4}$, utilizando SDIRK3 con un tamaño de paso en tiempo mayor. En concreto vamos a considerar $k = 10^{-3}$. En cuanto al parámetro espacial, consideraremos el mismo: $h = 10^{-2}$.
- Por otro lado, en cuanto a la absorción en la frontera, es de esperar que consigamos mejores resultados si utilizamos condiciones de frontera absorbentes de mayor orden que la CFA(1,0) que hemos utilizado. En concreto, vamos a utilizar la CFA(1,1) y a continuación la CFA(2,1) explicadas en la Sección 2.1.

En la Figura 3.3 vemos el resultado de realizar el mismo experimento numérico, es decir, (1.2)-(3.15) considerando el método SDIRK3 con $k = 10^{-3}$ y las distintas condiciones de frontera absorbentes obtenidas en la Sección 2.1 para el problema continuo: CFA(1,0), CFA(1,1) y CFA(2,1).

A la vista de la Figura 3.3 vemos cómo en el dominio interior, hasta $t = 2.5$ aproximadamente, las tres condiciones de frontera representan la misma gráfica. Esto es lógico pues hasta este instante de tiempo en la Figura 3.3 estamos viendo el error que proviene de la discretización de la ecuación en el dominio interior que es la misma en todos los casos. Para $t > 3$, cuando la solución va llegando a la frontera, empiezan a diferenciarse. En primer lugar, se observa que

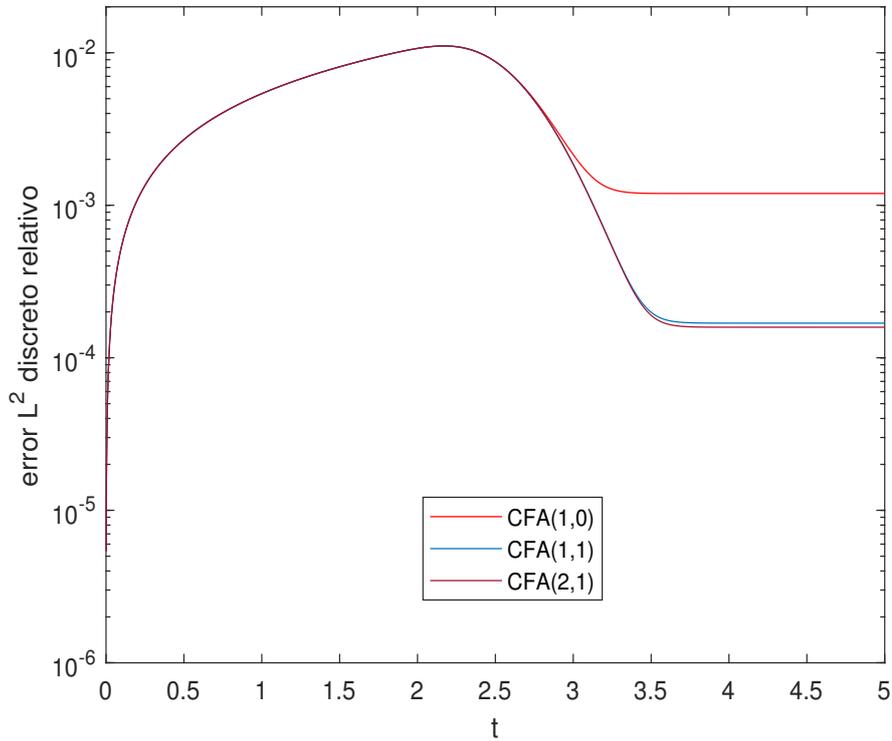


Figura 3.3: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y distintas condiciones de frontera absorbentes para el problema continuo. Resultados con $h = 10^{-2}$ y $k = 10^{-3}$.

la condición de frontera con un error más bajo es la CFA(2,1) y la que tiene un error más alto es CFA(1,0), lo que concuerda con lo que cabría esperar. Podemos ver que entre la condición CFA(1,0) y CFA(1,1) sí que se aprecia diferencia significativa, presentando una mejor absorción en la frontera la de mayor orden, es decir la CFA(1,1). Pero entre las condiciones CFA(1,1) y CFA(2,1) no se ve en esta gráfica una mejora significativa en la absorción. Esto es debido a que estamos utilizando condiciones de frontera absorbentes para el problema continuo y para el valor de h que estamos utilizando en la Figura 3.3, los resultados de absorción de CFA(2,1) no se ven claramente pues están siendo afectados por el error de la discretización en espacio de la propia condición de frontera. Si realizamos el mismo experimento con un valor de h menor, cabe esperar que mejoren los resultados para la CFA(2,1). Esto lo podemos ver en la Figura 3.4 donde, se ha realizado el mismo experimento numérico que en el Figura 3.3 pero con un valor de h menor: $h = 5 \times 10^{-3}$. Comparando con la Figura 3.3, vemos que los resultados de ambas condiciones de frontera absorbentes han mejorado, aunque más los de la CFA(2,1) que los de la CFA(1,1). Si disminuyéramos todavía más el valor de h , los resultados de la CFA(2,1) mejorarían todavía más.

Tras haber representado los resultados numéricos obtenidos con las condiciones de frontera absorbentes continuas para el experimento numérico considerado, ahora vamos a utilizar las condiciones de frontera absorbentes semidiscretas. Hemos realizado el mismo experimen-

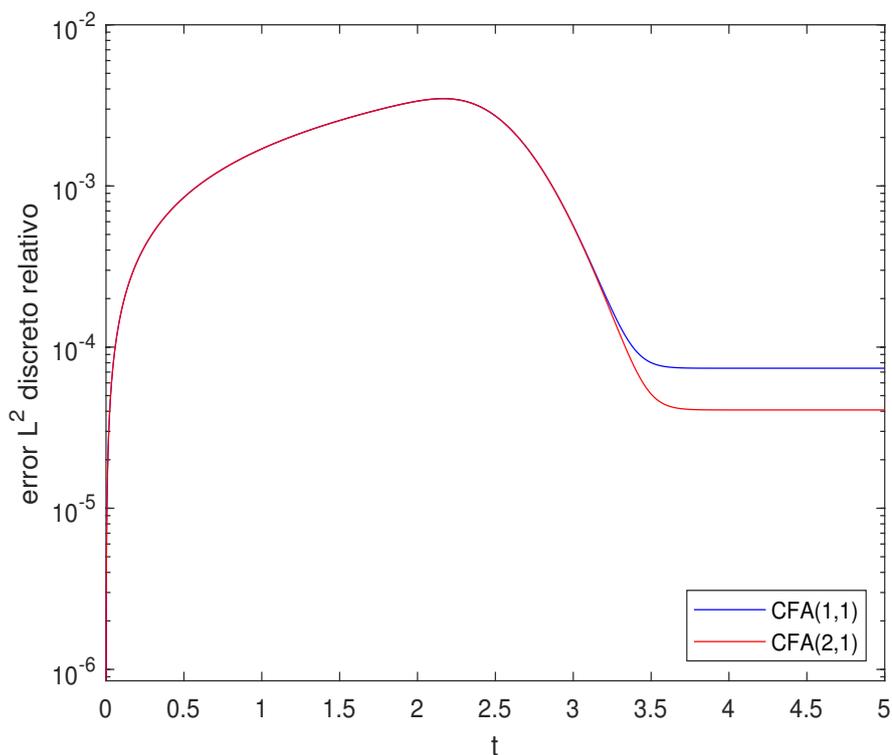


Figura 3.4: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3, CFA(1, 1) y CFA(2, 1) con $h = 5 \times 10^{-3}$ y $k = 10^{-3}$.

to numérico, es decir (3.14)-(3.15) y podemos ver los resultados de utilizar las CFAS(1,0), CFAS(1,1), CFAS(2,1) en la Figura 3.5 cuando se utiliza SDIRK3. Se han considerado los parámetros $h = 10^{-2}$ y $k = 10^{-3}$, al igual que en la Figura 3.3.

Podemos ver en la Figura 3.5 cómo mejora significativamente el orden de absorción entre las condiciones de frontera absorbentes semidiscretas. Para comparar cómo mejora la absorción de cada una de éstas con respecto a cada una de sus respectivas continuas, vamos a dibujar ahora en la Figura 3.6, en una misma gráfica, los resultados de todas las condiciones de frontera absorbentes continuas y semidiscretas para este experimento numérico.

Para diferenciarlas se han representado las condiciones de frontera absorbentes continuas CFA con un trazo discontinuo y las condiciones de frontera absorbentes semidiscretas CFAS con un trazo continuo. Además, se ha seleccionado el mismo color para las parejas CFA y CFAS del mismo orden. En la Figura 3.6 observamos que si comparamos la diferencia de absorción entre condiciones de frontera continuas y semidiscretas del mismo orden, a medida que éste aumenta se hace esta diferencia cada vez mayor a favor de las CFAS. Los resultados con las condiciones CFA(1, 0) y CFAS(1, 0) son prácticamente idénticas, los de las condiciones CFA(1, 1) y CFAS(1, 1) presentan cierta diferencia y finalmente las condiciones CFA(2, 1) y CFAS(2, 1) presentan una diferencia de absorción grande. Vemos además, cómo la condición de frontera CFAS(2, 1) tiene una absorción en la frontera mucho mejor que cualquiera de las otras condiciones de frontera.

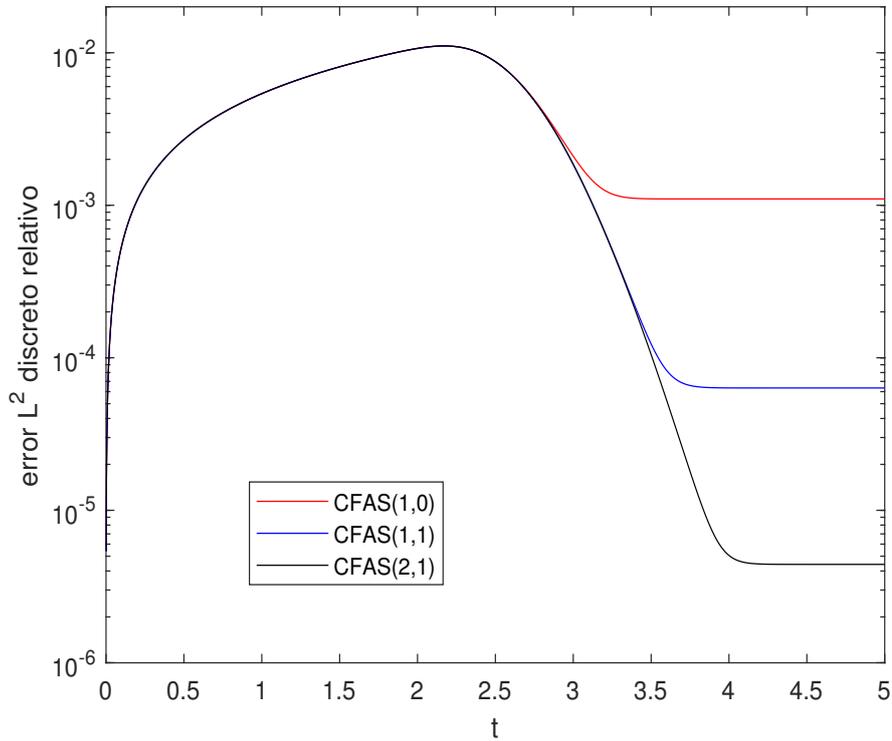


Figura 3.5: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y distintas CFAS.

Un detalle clave para entender lo que acabamos de comentar sobre la Figura 3.6, es decir, para entender la diferencia entre las condiciones de frontera absorbentes continuas CFA y las semidiscretas CFAS es que, si disminuyéramos el tamaño de h lo suficiente, obtendríamos con la CFA(2,1) un resultado similar que con la CFAS(2,1) para $h = 10^{-2}$. Sin embargo, disminuir el valor de h aumentaría en coste computacional y por esta razón, las condiciones de frontera absorbentes semidiscretas CFAS presentan una ventaja frente a las continuas CFA.

Experimento 2

A la vista de los buenos resultados de absorción de la condición de frontera absorbente semidiscreta CFAS(2,1) obtenidos en el experimento numérico anterior, ahora vamos a realizar otro experimento numérico con esta condición de frontera.

En este experimento vamos a resolver numéricamente el problema de valor inicial y de frontera (3.14) donde $u_0(x)$ viene dado por (3.1) con

$$\sigma = 4, \quad \tau = 6, \quad L = 50, \quad T_f = 4. \quad (3.16)$$

Hemos variado, con respecto al experimento 1, el valor del parámetro τ , el cual influye en la velocidad a la que viajaba la onda. Al tener en el actual experimento un valor de τ mayor,

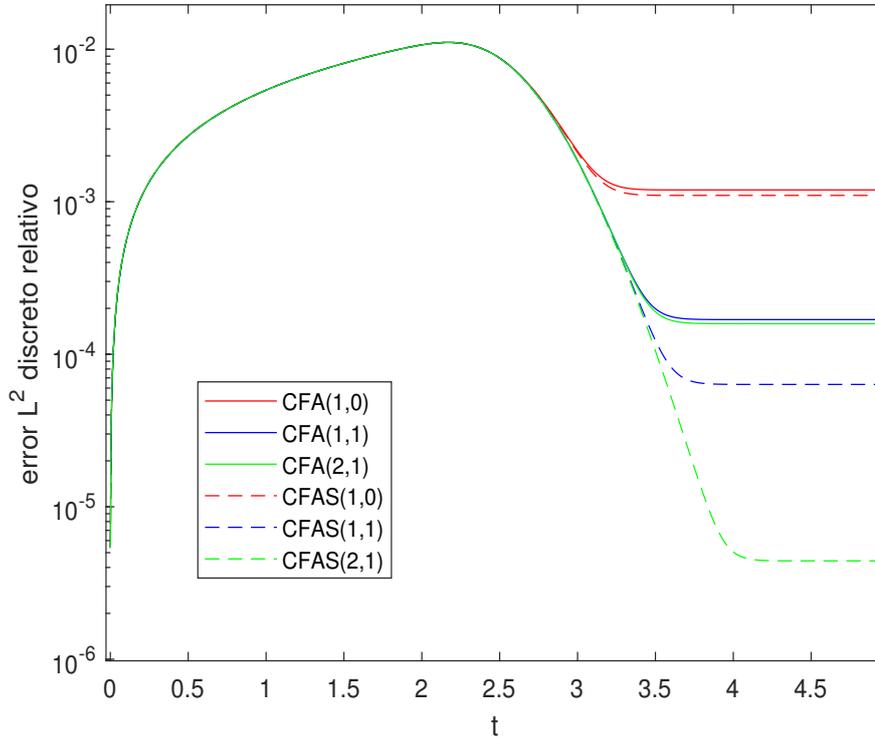


Figura 3.6: Experimento 1: (3.14)-(3.15). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y distintas condiciones de frontera absorbentes.

la velocidad será, en consecuencia, mayor: $v = 2 \cdot \tau = 2 \cdot 6 = 12$. Por lo que la solución llegará más rápido a la frontera.

Hemos realizado el experimento con SDIRK3 y los mismos valores de h y k que en el experimento anterior, es decir, $h = 10^{-2}$ y $k = 10^{-3}$. Vemos los resultados en la Figura 3.7. Podemos observar los buenos resultados de absorción, del orden de 10^{-6} , de la condición de frontera absorbente semidiscreta CFAS(2,1).

Experimento 3

En este nuevo experimento numérico vamos a considerar el problema de valor inicial y de frontera

$$\begin{aligned}
 i\partial_t u &= -\partial_x^2 u + Vu, & x \in [0, L], & \quad 0 < t < T_f, \\
 u(x, 0) &= \tilde{u}_0 \left(x - \frac{L}{2} \right), & x \in \mathbb{R}, \\
 \text{CFAS}(2,1) &\text{ en } x_i = 0, x_d = L, & t > 0,
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

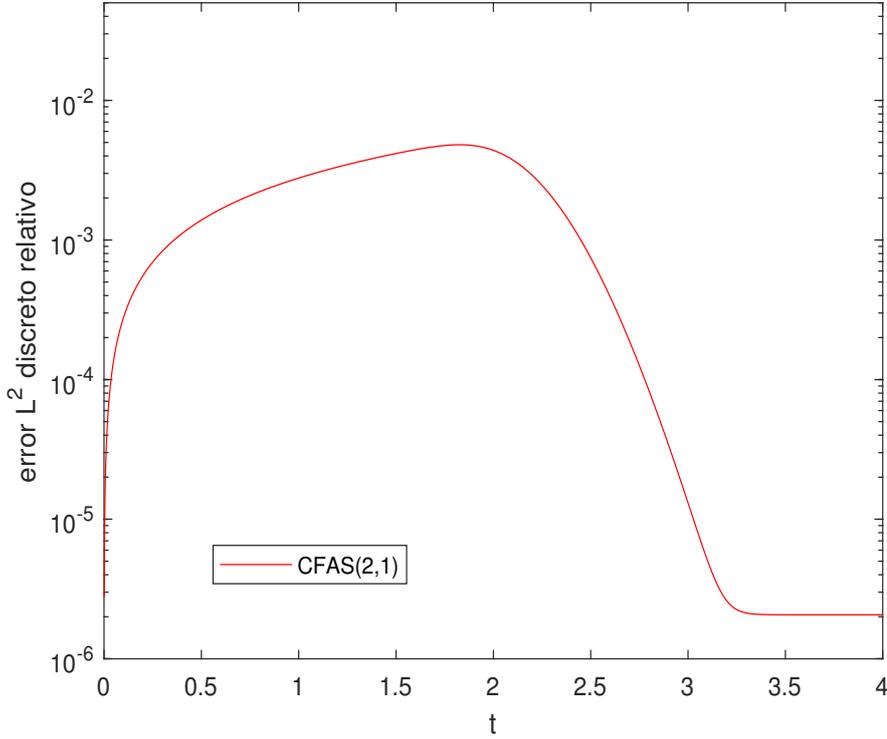


Figura 3.7: Experimento 2: (3.14)-(3.16). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y CFAS(2,1).

con $V = 0$ y siendo

$$\tilde{u}_0(x) = \exp\left[-\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right] \cdot \exp[i\tau(x)] + \exp\left[-\left(\frac{x}{\sigma_b}\right)^2\right] \cdot \exp[i\tau_b(x)], \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3.18)$$

que realmente es suma de dos funciones del tipo (3.1) que hemos considerado en los experimentos anteriores como condición inicial. Para este caso la solución exacta viene determinada por

$$u(x, t) = \left(1 + \frac{4it}{\sigma^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp[-i(\tau^2 + V)t] \exp\left[i\tau\left(x - \frac{L}{2}\right) - \frac{\left(x - \frac{L}{2} - 2\tau t\right)^2}{\sigma^2 + 4it}\right] + \left(1 + \frac{4it}{\sigma_b^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp[-i(\tau_b^2 + V)t] \exp\left[i\tau_b\left(x - \frac{L}{2}\right) - \frac{\left(x - \frac{L}{2} - 2\tau_b t\right)^2}{\sigma_b^2 + 4it}\right] \quad (3.19)$$

Los parámetros σ y σ_b y τ y τ_b que tomaremos en este experimento numérico son

$$\sigma = 4, \quad \sigma_b = 4, \quad \tau = 5, \quad \tau_b = -7, \quad L = 50, \quad T_f = 6. \quad (3.20)$$

Vamos a resolver el problema de valor inicial y de frontera (3.17) considerando la discretización en espacio con diferencias finitas que hemos explicado y utilizado anteriormente y para la

integración en tiempo utilizaremos el método SDIRK3. Tomaremos además el incremento de tiempo y de espacio $k = 10^{-3}$ y $h = 10^{-2}$.

En la Figura 3.8 hemos representado el módulo de la solución para varios instantes de tiempo. Se trata de dos ondas que inicialmente están juntas y centradas en $x = 25$ y a medida que avanza el tiempo, una de ellas viaja hacia la izquierda con velocidad $v_b = 2\tau_b = -14$ y otra viaja más lentamente hacia la derecha con velocidad $v = 2\tau = 10$. En tiempo $t = 1$, las ondas ya se han separado, como se ve en la Figura 3.8. En tiempo $t = 2$, la onda que viaja hacia la izquierda ya ha llegado a la frontera $x_i = 0$ y está siendo absorbida por la CFAS(2,1), de hecho en este instante de tiempo esta onda ya ha sido absorbida casi por completo y la onda que viaja a la derecha está empezando a llegar a la frontera derecha $x_d = 50$ y a ser absorbida. En $t = 3$, esta onda ya ha llegado totalmente a la frontera y sigue siendo absorbida por la CFAS(2,1). En $t = 6$, ambas ondas han sido ya absorbidas y solo han quedado pequeños reflejos del orden de 10^{-6} .

Por otra parte, en la Figura 3.9 podemos ver para este experimento numérico el error L^2 discreto como función del tiempo.

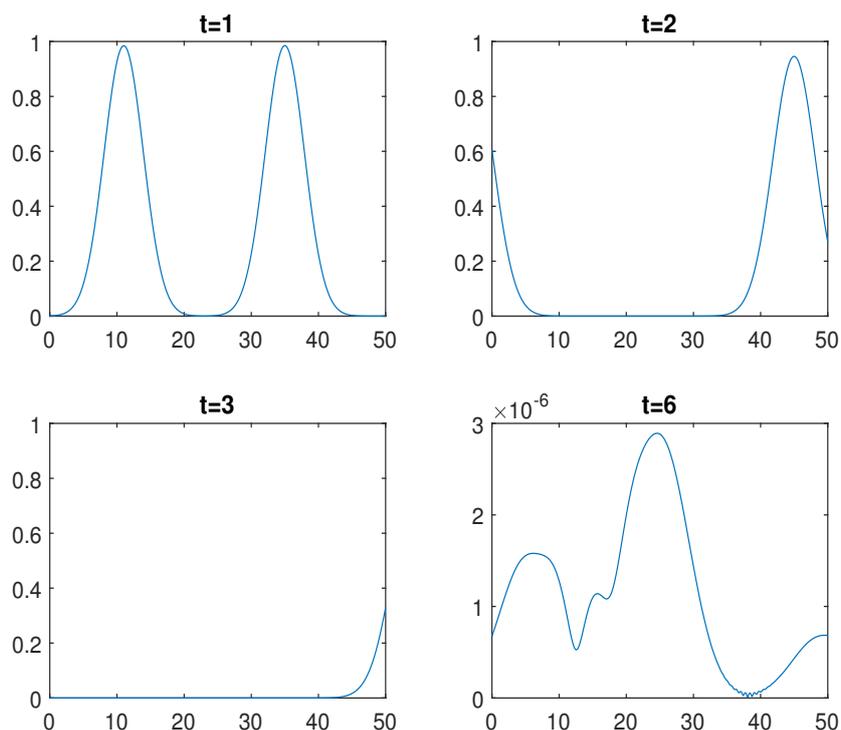


Figura 3.8: Experimento 3: (3.17)-(3.20). Módulo de la solución numérica para distintos instantes de tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y CFAS(2,1).

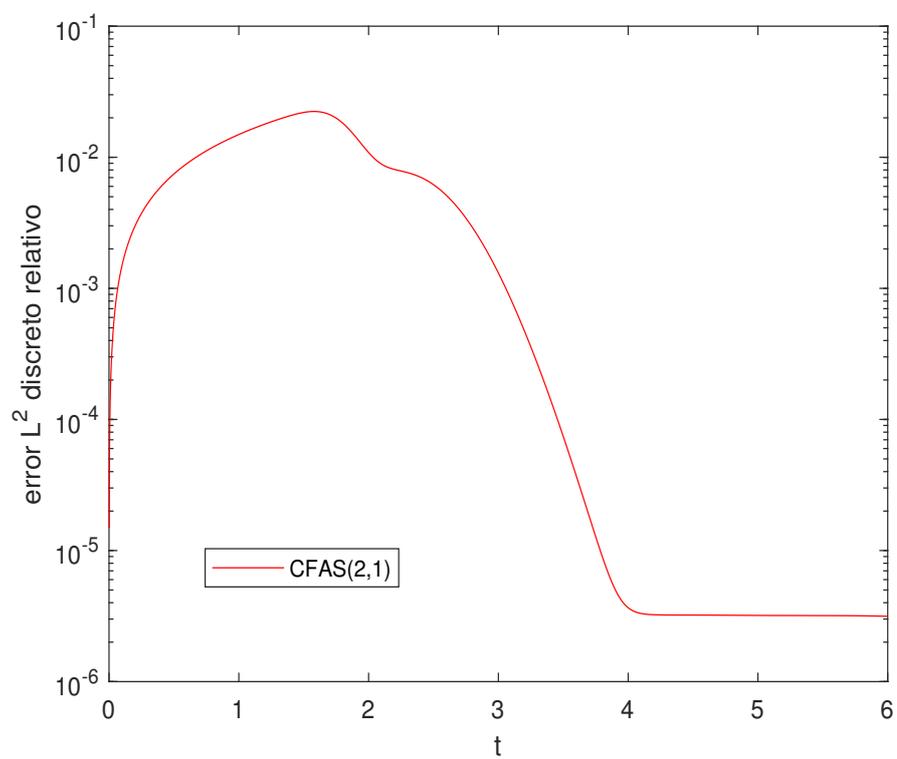


Figura 3.9: Experimento 3: (3.17)-(3.20). Error relativo como función del tiempo cuando se utiliza SDIRK3 y CFAS(2,1).

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo hemos planteado el problema de valor inicial para la ecuación lineal de Schrödinger definida en un dominio espacial no acotado. Para resolver numéricamente dicho problema es necesario restringirse a un subdominio finito e imponer condiciones de frontera artificiales. En este trabajo hemos obtenido las condiciones de frontera transparentes tanto para el problema continuo, como para el problema semidiscreto en tiempo o en espacio.

Tras explicar el inconveniente del carácter no local de las condiciones de frontera transparentes, hemos construido condiciones de frontera absorbentes locales. Estas condiciones de frontera se construyen como aproximación a las transparentes y permiten pequeños reflejos de la solución cuando llega a la frontera. Hemos deducido condiciones de frontera absorbentes para el problema continuo (CFA) y también para el problema semidiscreto en espacio (CFAS) cuando se considera un esquema de diferencias finitas de segundo orden.

Por último, mediante los experimentos numéricos realizados, hemos podido estudiar y comprender mejor las distintas condiciones de frontera absorbentes construidas en este trabajo y también analizar los errores cometidos debido a la integración numérica de la ecuación en el dominio interior. En dichos experimentos numéricos hemos visto cómo la absorción aumenta al incrementar el orden de la condición de frontera absorbente. También hemos analizado la diferencia entre las CFA y las CFAS, viendo cómo con las CFAS obtenemos una mejor absorción en la frontera para valores del parámetro espacial h no necesariamente pequeños. Sin embargo, para obtener la misma absorción con las CFA es necesario disminuir el valor de h hasta que el error que proviene de la discretización espacial de la propia condición de frontera no afecta a los resultados de absorción.

Apéndice A

Métodos numéricos para resolver un problema de valor inicial de ecuaciones diferenciales ordinarias

En este apéndice vamos a explicar brevemente en qué consisten los métodos numéricos para resolver un problema de valor inicial de ecuaciones diferenciales ordinarias que han sido considerados en este trabajo (véase [25], [21] y [22]). Consideremos en primer lugar el problema de valor inicial de ecuaciones diferenciales ordinarias que queremos resolver numéricamente:

$$\begin{cases} y'(s) = f(t, y), & t_0 \leq t \leq t_f \\ y(t_0) = y_0, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Denotemos por $Y(t)$ la solución de este problema de valor inicial (PVI). Los métodos numéricos para resolver este PVI proporcionan valores aproximados a la solución en un conjunto de nodos:

$$t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N \leq t_f$$

que, en este trabajo, consideraremos equiespaciados:

$$t_n = t_0 + nk, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

Denotaremos por y_n , $n = 1, 2, \dots, N$ dichas aproximaciones. Es decir:

$$y_1 \approx Y(t_1), \quad y_2 \approx Y(t_2), \quad \dots, \quad y_N \approx Y(t_N).$$

Las aproximaciones y_1, y_2, \dots, y_N se pueden obtener mediante distintos métodos numéricos. Aquí vamos a explicar brevemente en qué consisten alguno de ellos:

1. Métodos Runge-Kutta

Los métodos Runge-Kutta son métodos de un paso. Esto quiere decir que para obtener la aproximación numérica y_{n+1} en t_{n+1} solo se utiliza información sobre la aproximación numérica en el paso anterior t_n , es decir y_n .

La fórmula que define a un método *Runge-Kutta* de s etapas es la siguiente

$$y_{n+1} = y_n + k \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i k, Y_i),$$

donde

$$Y_i = y_n + k \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j k, Y_j), \quad i \in \{1, \dots, s\}.$$

Las cantidades Y_i para $i \in \{1, \dots, s\}$ se llaman *etapas internas del método*, y éste está definido por los parámetros b_i, c_i para $i \in \{1, \dots, s\}$, y a_{ij} para $i, j \in \{1, \dots, s\}$.

Los coeficientes de un método Runge-Kutta se suelen representar en forma compacta por medio del *tablero de Butcher* definido como

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array}$$

verificándose

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i \in \{1, \dots, s\}.$$

En particular, en este trabajo, hemos considerado los siguientes métodos Runge-Kutta:

- **Regla del trapecio.** La regla del trapecio viene dada por la fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})].$$

- **Método de Euler implícito.** El método de Euler implícito está definido por la expresión

$$y_{n+1} = y_n + k f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

2. **Métodos lineales multipaso.** Los métodos multipaso, a diferencia de los métodos de un paso, utilizan información de más de un paso anterior para calcular el siguiente valor. En particular, un método lineal multipaso utiliza una combinación lineal de y_i y $f(t_i, y_i)$ para calcular el valor de y para el paso deseado. Un método lineal multipaso adopta la forma

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = k \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}, \quad (\text{A.2})$$

siendo

$$f_{n+j} = f(x_{n+j}, y_{n+j}), \quad j \in \{0, 1, \dots, k\}.$$

y donde se verifica

$$|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0, \quad \alpha_k = 1.$$

Bibliografía

- [1] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Condiciones frontera transparentes y absorbentes para la ecuación de Schrödinger en una dimensión*, Proceedings of the 16th Congress on Differential Congress on Differential Equations and Applications and 6th Congress on Applied Mathematics, Las Palmas de Gran Canaria, Spain, 1999, pp. 467-473.
- [2] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Weak ill-posedness of spatial discretizations of absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations*, SIAM J. Number. Anal., **40** (2002), pp. 134-158.
- [3] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Discrete absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. Construction and error analysis*, SIAM J. Number. Anal., **41** (2003), pp. 1824-1850.
- [4] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Adaptative absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations*, in: Proceedings of the sixth international conference on mathematical and numerical aspects of wave propagation, WAVES 2003, Jyväskylä, Finland, Springer, 2003.
- [5] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Discrete absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. Practical implementation*, Math. Comp., **73** (2004), pp. 127-142.
- [6] I. ALONSO-MALLO, N. REGUERA - *Condiciones de frontera absorbentes para la ecuación de Schrödinger no lineal discretizada con elementos finitos*, Proceedings of the 20th Congress on Differential Congress on Differential Equations and Applications and 10th Congress on Applied Mathematics, Sevilla, Spain, 2007, pp. 1-5.
- [7] X. ANTOINE, C. BESSE - *Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation*, J. Comput. Phys., **188** (2003), pp. 157-175.
- [8] X. ANTOINE, C. BESSE - *Artificial boundary conditions for Schrödinger-type equations and their numerical approximation*, in: Advances in Scientific Computing and Applications, Y.Y. Lu, W.W. Sun and T. Tang Eds., Science Press, Beijing/New York, 2004, pp. 8-21.
- [9] X. ANTOINE, C. BESSE, S. DESCOMBES - *Artificial boundary conditions for one-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equations using non-reflecting boundary conditions*, Math. Comp., **73** (2004), pp. 1779-1799.
- [10] X. ANTOINE, C. BESSE, S. DESCOMBES - *A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations*, Commun. Comput. Phys., **4** (2008), pp. 729-796.

-
- [11] V.A. BASKAKOV AND A.V. POPOV - *Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation*, Wave Motion, **14** (1991), pp. 123-128.
- [12] A. BUGAJEV, R. CIEGIS, R. KRIAUSIENE, T. LEONAVICIENE AND J. ZILINSKAS - *On the Accuracy of Some Absorbing Boundary Conditions for the Schrödinger Equation*, Math. Model. and Anal., **22** No.3, (2017), pp. 408-423.
- [13] L. BUGNIES, O. VANBÉSIEN AND D. LIPPENS - *Transient analysis of ballistic transport in stublike quantum waveguides*, Appl. Phys. Lett., **71** (1997), pp. 803-805.
- [14] L. DI MENZA - *Absorbing boundary conditions on a hypersurface for the Schrödinger equation in a half-space*, Appl. Math. Lett., **9** (1996), pp. 55-59.
- [15] L. DI MENZA - *Transparent and absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation in a bounded domain*, Numer. Funct. Anal. Optim., **18** (1997), pp. 759-775.
- [16] T. FEVENS AND H. JIANG - *Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation*, SIAM J. Sci. Comput., **21** (1999), pp. 225-282.
- [17] J.P. KUSKA - *Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation on finite intervals*, Phys. Rev. B, **46** (1992), pp. 5000-5003.
- [18] M.F. LEVY - *Parabolic equation models for electromagnetic wave propagation*, IEE Electromagnetic Waves Series, **45** (2000).
- [19] M. EHRHARDT - *Discrete Artificial Boundary Conditions*, Ph.D. Tesis, Technische Universität Berlin, 2001.
- [20] M. EHRHARDT, A. ARNOLD - *Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation*, Riv. Mat. Univ. Parma **6**, (2001), pp. 57-108.
- [21] E. HAIRER, S.P. NORSETT, G. WANNER - *Solving ordinary differential equations I*, Springer-Verlag, Berlín, 1993.
- [22] E. HAIRER, G. WANNER - *Solving ordinary differential equations II*, Springer-Verlag, Berlín, 1993.
- [23] N. REGUERA - *Stability of a class of matrices with applications to absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations*, to appear in Appl. Math. Lett.
- [24] N. REGUERA - *Analysis of a third order absorbing condition for the Schrödinger equation discretized in space*, to appear in Appl. Math. Lett.
- [25] J. M. SANZ-SERNA, M. P. CALVO - *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall, London, 1994.
- [26] F. SCHMIDT AND P. DEUFLHARD - *Discrete transparent boundary conditions for the numerical solution of Fresnel's equation*, Comput. Math. Appl., **29** (1995), pp. 53-76.
- [27] F. SCHMIDT - *Construction of discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations*, Surv. Math. Ind., **9** (1999), pp. 87-100.
- [28] T. SHIBATA - *Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one dimensional Schrödinger equation*, Phys. Rev. B, **43** (1991), pp. 6760-6763.

- [29] F.D. TAPPERT - *The parabolic approximation method, in Wave Propagation and Underwater Acoustics*, Lecture Notes en Physics 70, eds. J.B. Keller and J.S. Papadakis, Springer, New York, 1997, pp. 224-287.
- [30] J. XIE AND M. LI - *A fast BDF2 Galerkin finite element method for the one-dimensional time-dependent Schrödinger equation with artificial boundary conditions*, App. Numer. Math., **187**, (2023), pp. 89–106.
- [31] D. YEVICK, T. FRIESE AND SCHMIDT - *A comparison of transparent boundary conditions for the Fresnel equation*, J. Comput. Phys, **168**, (2001), pp. 433-444.
- [32] A. ZISOWSKY, M. EHRHARDT - *Discrete artificial boundary conditions for the nonlinear Schrödinger equations*, Math. Comput. Modell, **47**, (2008), pp. 1264-1283.