

**UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS**

FACULTAD DE CIENCIAS MATEMÁTICAS

E A. P. DE MATEMÁTICAS

**La Ecuación lineal de Schrödinger:**

un estudio numérico

TESIS

para optar el título profesional de Licenciado en Matemática

AUTOR

Johnny Robert Avendaño Quiroz

**Lima-Perú**

**2009**

# La ecuación lineal de Schrödinger: un estudio numérico

**Johnny Robert Avendaño Quiroz**

Tesis presentada a consideración al Cuerpo Docente de la Escuela Académico Profesional de Matemática de la Facultad de Ciencias Matemáticas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, como parte de los requisitos para optar el Título de Licenciado en Matemática.

Aprobada por:

---

Mg. Jorge Icaro Condado Jáuregui  
PRESIDENTE

---

Mg. Edinson Raúl Montoro Alegre  
Miembro

---

Dr. Víctor Rafael Cabanillas Zannini  
Miembro Asesor

Lima, Perú

2009

## FICHA CATALOGRÁFICA

Avendaño Quiroz, Johnny Robert.  
La ecuación lineal de Schrödinger: un estudio numérico.  
(Lima) 2009  
vii, 55p. 29,7cm (UNMSM, Lic. Matemática, 2009  
Tesis, Universidad Nacional Mayor de San Marcos.  
Facultad de Ciencias Matemáticas. 1. Matemáticas  
I. UNMSM / FCM II. Título  
(Serie).

A mis preciosos hijos Andres y Paulo.

## AGRADECIMIENTOS

Mis agradecimientos para mi amigo y colega Rafael Cabanillas Zannini por las muchas sugerencias impartidas, así también por su apoyo sin el cual no se hubiese concretado este trabajo.

También quiero agradecer el apoyo desinteresado que me brindaron, colegas amigos como Victor Osorio y Jorge Condado, que se concretizó con la disertación final de esta tesis.

Siendo este trabajo de pregrado, no puedo ignorar a quienes fueron mis maestros y maestras, en especial al profesor Pedro Espinoza Haro, quien supo tener una idea clara desde el inicio para un trabajo final de este tipo, también al profesor Edgar Vera Saravia por su especial paciencia y dedicación para con nosotros.

A mi hermosa familia, de quienes recibí el apoyo y la fuerza para seguir adelante; a quienes siempre les estaré en deuda por haberles tomado su valioso tiempo.

Finalmente, a mis padres que descansan en el regazo del señor, a mi madre de quién recibí todo lo que soy.

# Índice general

. Introducción	1
<b>1. El método de diferencias finitas</b>	<b>3</b>
1.1. Aproximaciones en diferencias finitas para las derivadas . . . . .	3
1.2. Esquemas en diferencias finitas . . . . .	6
1.3. Consistencia . . . . .	7
1.4. Tratamiento descriptivo de la convergencia . . . . .	7
1.5. Tratamiento descriptivo de la estabilidad . . . . .	8
<b>2. Análisis de los esquemas</b>	<b>14</b>
2.1. Esquema implícito . . . . .	22
2.1.1. Estabilidad . . . . .	22
2.1.2. Consistencia . . . . .	27
2.1.3. Convergencia . . . . .	28
2.2. Esquema de Crank-Nicolson . . . . .	28
2.2.1. Estabilidad . . . . .	29
2.2.2. Consistencia . . . . .	33
2.2.3. Convergencia . . . . .	35
<b>3. Resultados Numéricos</b>	<b>36</b>
<b>A. Algunos teoremas</b>	<b>48</b>
<b>B. Algoritmos</b>	<b>51</b>
. Bibliografía	55

## RESUMEN

### La ecuación lineal de Schrödinger: un estudio numérico

Johnny Robert Avendaño Quiroz  
Febrero, 2009

Asesor: Dr. Victor Rafael Cabanillas Zannini.

Título obtenido: Licenciado en Matemática.

En este trabajo obtendremos resultados de estabilidad, consistencia y convergencia para dos esquemas diferentes de discretización basados en el método de diferencias finitas para el siguiente problema de estabilización en la frontera de la ecuación de Schrödinger:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \quad \text{en } (0, 1) \times (0, \infty) \\ u(1, t) = 0 \quad , \quad \forall t \in (0, \infty) \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = -\alpha \frac{\partial u}{\partial t} \quad , \quad \forall t \in (0, \infty) \quad , \quad \alpha > 0 \\ u(x, 0) = f(x) \quad , \quad \forall x \in (0, 1) \end{array} \right.$$

Palabras claves:

Análisis numérico.  
Ecuación de Schrödinger.  
Diferencias finitas.

## SUMMARY

### Linear Schrödinger equation: a numerical study

Johnny Robert Avendaño Quiroz  
Febrero, 2009

Adviser: Dr. Victor Rafael Cabanillas Zannini.

Degree: Mathematics.

In this work we obtain results of stability, consistency and convergence for two distinct schemes of discretization based on the the finite difference method for the following problem of boundary stabilization for the Schrödinger equation:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \quad \text{in } (0, 1) \times (0, \infty) \\ u(1, t) = 0 \quad , \quad \forall t \in (0, \infty) \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = -\alpha \frac{\partial u}{\partial t} \quad , \quad \forall t \in (0, \infty) \quad , \quad \alpha > 0 \\ u(x, 0) = f(x) \quad , \quad \forall x \in (0, 1) \end{array} \right.$$

Keywords:

Numerical analysis.  
Schrödinger Equation.  
Finite difference.



# Introducción

Muchos problemas en diversas áreas de ciencias, tales como física, ingeniería entre otras, son modeladas matemáticamente en términos de ecuaciones en derivadas parciales. Pocas ecuaciones poseen soluciones en términos de funciones elementales, esto es, pocas tienen soluciones exactas; así estos problemas necesitan de una solución numérica (aproximada), y para esto es natural pensar en hacer uso de métodos numéricos que nos lleven a soluciones aproximadas.

Los métodos numéricos arrastran, por su propia naturaleza, un gran esfuerzo de cálculos, en consecuencia una gran probabilidad de acumulación de errores. La utilización de la computadora se hace imprescindible, mas aún si deseamos obtener soluciones próximas de la real; sin embargo, no siempre es fácil programar un determinado método para después sistematizarlo totalmente.

Uno de los métodos mas empleados en la búsqueda de soluciones de problemas de ecuaciones en derivadas parciales es el método de diferencias finitas, sin embargo, este método presenta algunas interrogantes al ser aplicado a problemas poco estudiados desde el punto de vista del análisis numérico. Entre algunas de estas dificultades están las condiciones de contorno, la gran complejidad cuando se emplean mallas irregulares y también el sistema de ecuaciones lineales obtenidos que no siempre son bien condicionados.

En este trabajo haremos el estudio numérico para el problema estabilización en la frontera de la ecuación de Schrödinger lineal.

Esta ecuación es empleada en mecánica cuántica para describir la posición de una partícula bajo un cierto potencial; existen versiones mas simples de esta ecuación, por ejemplo la empleada para describir un frente de ondas marinas, vea [5]. Obviamente estas van difiriendo de acuerdo a sus condiciones iniciales o de frontera lo que a la larga determina la complejidad del método a usar.

El problema que vamos a abordar consiste en forzar el decaimiento exponencial uniforme de la energía cuando  $t \rightarrow +\infty$  mediante la acción de un término disipativo en una parte de la frontera del dominio. La formulación matemática original es la siguiente:

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n \leq 3$ , un dominio limitado con frontera  $\Gamma = \partial\Omega$  de clase  $C^3$

Fijado  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , se define:

$$m(x) = x - x_0, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

donde la frontera  $\Gamma$  es dividida en dos partes:

$$\Gamma_0 = \Gamma(x_0) = \{x \in \Gamma ; (m(x), \eta(x)) > 0\}$$

$$\Gamma_1 = \Gamma_*(x_0) = \{x \in \Gamma ; (m(x), \eta(x)) \leq 0\}$$

donde  $\eta$  es el vector unitario normal exterior a  $\Omega$  en el punto  $x \in \Gamma$ .

Considere el problema:

$$\begin{cases} i\frac{\partial u}{\partial t} + \Delta u = 0 & , \text{ en } \Omega \times \mathbb{R}^+ \\ u = 0 & , \text{ en } \Gamma_1 \times \mathbb{R}^+ \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = -(m, \eta)u_t & , \text{ en } \Gamma_0 \times \mathbb{R}^+ \\ u(0) = f(x) & , \text{ en } \Omega \end{cases}$$

donde  $f$  es nulo en  $\Gamma_1$ , y la notación  $(\cdot, \cdot)$  representa el producto interno usual en  $\mathbb{R}^n$ .

La existencia y unicidad de la solución de este problema es demostrada por Machtyngier en [3] y en [4], así como el decaimiento exponencial de la energía de la solución. Nuestro trabajo consiste en verificar este hecho numéricamente haciendo uso de los recursos del ordenador y del análisis de los esquemas a ser considerados.

En todos los capítulos consideraremos una malla rectangular uniformemente espaciada para evitar problemas al generar las ecuaciones lineales, además de sistematizar la implementación computacional.

Mostramos los análisis y los resultados en el caso de  $n = 1$ , por tratarse de un enfoque didáctico, pero el esquema puede ser generalizado para  $n = 2$  y  $n = 3$  tomándose mucho cuidado con las respectivas cuentas. En el caso de la elección de las mallas, estas generalmente se deben al tipo de problema.

Seguiremos el siguiente esquema para presentar este trabajo:

En el capítulo I presentamos conceptos y fundamentos teóricos del método de diferencias finitas.

En el capítulo II aplicaremos el método a una EDP, así como un estudio comparativo de diversos esquemas a usar.

En el capítulo III presentamos algunos resultados numéricos, además de efectuar una comparación numérica de los esquemas usados.

En el apéndice A presentamos algunos teoremas que son generalmente utilizados en las demostraciones de estabilidad del método numérico.

En el apéndice B incluimos los algoritmos que implementamos para conseguir los resultados numéricos.

# Capítulo 1

## El método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas consiste en lo siguiente, dada una región o dominio, esta es sustituida por un conjunto finito de nodos (o puntos) también llamado de malla; en lugar de las funciones de argumento continuo se considera las de argumento discreto, definidas en los nodos de la malla. Las derivadas que figuran en la ecuación diferencial son sustituidas (aproximadas) por cocientes de diferencias, esto es, combinaciones lineales de valores de la función aproximada en varios nodos sobre la malla; en consecuencia, la ecuación diferencial es sustituida por un sistema de ecuaciones algebraicas (la ecuación en diferencias). Las condiciones de frontera también son sustituidas por condiciones de contorno en diferencias para la función aproximada.

Es natural exigir después de esto que el problema en diferencias obtenido de este modo sea soluble y que la solución se aproxime (convergencia), al aumentar el número de nodos de la malla, de la solución aproximada del problema original para la ecuación diferencial. Esta es la cuestión central del análisis numérico de ecuaciones diferenciales; es decir, garantizar la convergencia de un esquema numérico bajo ciertas características geométricas de la malla.

### 1.1. Aproximaciones en diferencias finitas para las derivadas

Todos los métodos de discretización para la obtención de una solución numérica, consisten en sustituir el dominio continuo  $D$  por una malla o red de nodos contenidos en el dominio  $D$ .

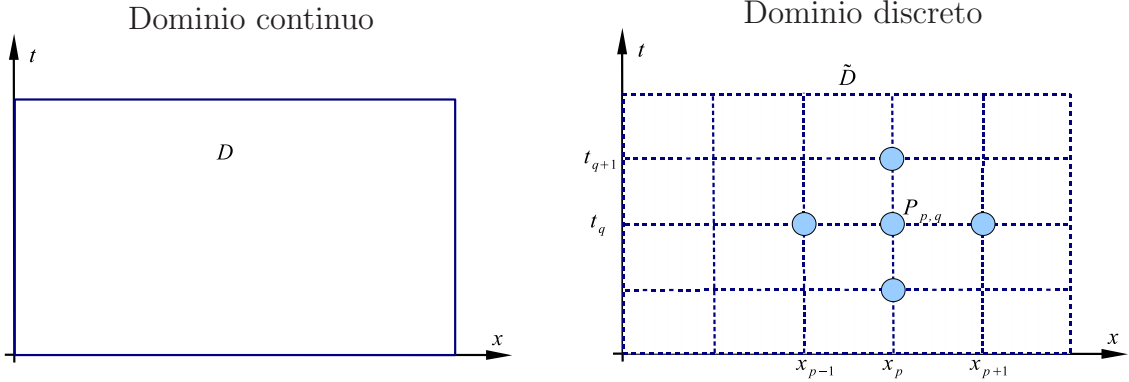
Esto se consigue subdividiendo  $D$  en rectángulos de lados  $h = \delta x$ ,  $k = \delta t$ , y denotando las coordenadas de los puntos de la malla como:

$$\begin{aligned}x_p &= ph \\t_q &= qk ; \text{ tal que } p, q \in \mathbb{N} \\P(x_p, t_q) &= P_{p,q}\end{aligned}$$

Así, el dominio discreto queda establecido como:

$$\tilde{D} = \{P_{p,q} = (x_p, t_q) ; \text{ tal que } p, q \in \mathbb{N}\}$$

tal como se muestra en la figura:



Denotamos el valor de  $u$  en el punto  $P(x, t)$  como:

$$u_P = u(x, t) = u(ph, qk) = u_{p,q} \quad (1.1)$$

Tomamos los subíndices  $p$  y  $q$  para representar los nodos en las respectivas variables, sin embargo en muchos trabajos y textos es usual usar los índices  $i$  y  $j$ , vea [1], [9] y [10]; nuestra elección se debe al hecho de que el coeficiente  $i$  estará representando la constante imaginaria  $i = \sqrt{-1}$ , así para evitar algún conflicto con la notación usual usaremos  $p$  y  $q$  en lo que resta de la redacción.

**Notación para funciones de varias variables:**

Sea la función  $u$  definida de la siguiente forma:

$$u : \Omega \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R} \\ (x, t) \mapsto u(x, t)$$

Consideremos la función  $u$  y sus derivadas con respecto a la variable  $x$  como funciones continuas; y si mantenemos  $x$  y  $t$  fijados (momentáneamente omitimos  $t$  para no tener mucha notación de subíndices), del teorema de Taylor tendremos que:

$$u(x + h) = u(x) + hu'(x) + \frac{1}{2}h^2u''(x) + \frac{1}{6}h^3u'''(x) + \dots \quad (1.2)$$

$$u(x - h) = u(x) - hu'(x) + \frac{1}{2}h^2u''(x) - \frac{1}{6}h^3u'''(x) + \dots \quad (1.3)$$

Sumando estas ecuaciones, obtenemos:

$$u(x - h) + u(x + h) = 2u(x) + h^2u''(x) + \frac{1}{12}h^4u''''(x) + \dots$$

luego:

$$\frac{u(x - h) - 2u(x) + u(x + h)}{h^2} = u''(x) + \frac{1}{12}h^2u''''(x) + \dots \quad (1.4)$$

denotando:

$$O(h^2) = \frac{1}{12}h^2u''''(x) + \dots$$

y como  $O(h^2)$  es despreciable con respecto a las potencias menores de  $h$ , tenemos:

$$u''(x) = \left( \frac{d^2 u}{dx^2} \right) \approx \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} \quad (1.5)$$

además de esto, restando (1.3) de (1.2), obtenemos:

$$u(x+h) - u(x-h) = 2hu'(x) + \frac{h^3}{3}u'''(x) + \dots$$

y despreciando los terminos con potencias de  $h$  mayores o iguales a tres, se obtiene:

$$u'(x) = \left( \frac{du}{dx} \right) \approx \frac{1}{2h}(u(x+h) - u(x-h)) \quad (1.6)$$

esta ecuación es llamada de diferencias centradas.

También, de la ecuación (1.2), despreciando las potencias mayores de  $h$ , obtenemos:

$$u'(x) \approx \frac{1}{h}(u(x+h) - u(x)) \quad (1.7)$$

que es denominada de diferencias progresivas.

Análogamente, de la ecuación (1.3), se obtiene:

$$u'(x) \approx \frac{1}{h}(u(x) - u(x-h)) \quad (1.8)$$

que es denominada de diferencias regresivas.

Empleando la notación hecha en (1.1), la ecuación (1.5) queda denotada:

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_P = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{p,q} \approx \frac{u((p-1)h, qk) - 2u(ph, qk) + u((p+1)h, qk)}{h^2}$$

es decir:

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{p,q} \approx \frac{u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}}{h^2} \quad (1.9)$$

con un error del orden de  $h^2$ .

Análogamente con esta misma notación la aproximación en diferencias regresivas para  $\frac{\partial u}{\partial t}$  en las coordenadas  $(x, t+k)$  con  $x$  fijado, es:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t+k) \approx \frac{1}{k}(u(x, t+k) - u(x, t))$$

es decir:

$$\left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{p,q+1} \approx \frac{1}{k}(u_{p,q+1} - u_{p,q}) \quad (1.10)$$

con un error de  $O(k)$ .

## 1.2. Esquemas en diferencias finitas

La parte fundamental o decisiva de un esquema de discretización es la reducción del sistema continuo a un sistema discreto “equivalente”, el cual sea apropiado para un cálculo rápido y directo de la solución. Esto es hecho, sustituyendo adecuadamente el operador diferencial  $T$  de la ecuación de Schrödinger por un operador de diferencias denotado por  $T_h$ :

$$\begin{array}{l} \text{Problema Continuo:} \\ \text{Problema Discreto:} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} T[u] = i \frac{\partial}{\partial t}(u) + \Delta(u) = 0 \\ \text{Condiciones de contorno} \\ \text{Ecuaciones en diferencias finitas : } T_h[u] = 0 \\ \text{Condiciones de contorno en diferencias finitas} \end{array} \right.$$

donde  $T_h$  relaciona las ecuaciones en diferencias usadas para aproximar  $T$ .

Los métodos en diferencias finitas pueden ser divididos en dos clases; la primera, es el de los métodos explícitos, que involucra solo un nodo desconocido en el paso  $(n + 1)$ -ésimo y la segunda es llamada de métodos implícitos, los cuales involucran mas de un nodo desconocido en el paso  $(n + 1)$ -ésimo.

1. **Esquema implícito:** este esquema es expresado de la siguiente forma:

$$T_h[u_{p,q}] = i \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1} \quad (1.11)$$

donde  $\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1}$  está representado por la ecuación (1.10) y  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1}$  está representada por la ecuación (1.9).

2. **Esquema implícito de Crank-Nicolson:** este esquema consiste en presentar una semi suma de la siguiente manera:

$$T_h[u_{p,q}] = i \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q} \right) \quad (1.12)$$

donde los valores de  $u$  en los nodos del paso  $q$ -ésimo son conocidos y son desconocidos en el paso  $(q + 1)$ -ésimo, los cuales proporcionarían variables a resolver.

En lo sucesivo denominaremos a este último esquema como el método de Crank-Nicolson y al anterior como simplemente de método implícito.

### 1.3. Consistencia

Sea  $v$  una función perteneciente al dominio del operador  $T$  (operador diferencial). El operador  $T_h$  puede ser considerado como una aproximación del operador  $T$  si,

$$T[v] - T_h[v] \equiv \tau[v] \rightarrow 0, \text{ cuando } h \rightarrow 0$$

Así, tenemos la siguiente definición:

**Definición 1.1** Sea  $\tilde{D}$  el conjunto para el cual  $T_h[v]$  está definido. Entonces el operador  $T_h$  y también el método de diferencias definido por él, es llamado de consistente con el problema continuo, es decir, con nuestra EDP, si:

$$\max_{(x,t) \in \tilde{D}} \| T[v](x,t) - T_h[v](x,t) \| \rightarrow 0, \text{ cuando } h, k \rightarrow 0$$

Si  $v = u$  es la solución exacta de  $T[u] = 0$ , tenemos

$$\max_{(x,t) \in \tilde{D}} \| T_h[u](x,t) \| \rightarrow 0, \text{ cuando } h, k \rightarrow 0$$

Si además de esto, existen constantes  $h_0, k_0, C_1, C_2, \theta$  y  $\omega$  tales que, para  $h < h_0$  y  $k < k_0$ :

$$\max_{(x,t) \in \tilde{D}} \| \tau[u] \| \leq C_1 h^\theta + C_2 k^\omega$$

Entonces el método es del orden (de consistencia)  $\gamma = \min(\theta, \omega)$  ■ .

El caso mas general de esta definición con respecto al orden de consistencia puede ser visto en la referencia [7].

A partir de este momento, denotaremos por  $U$  la solución exacta de nuestra EDP y por  $u$  la solución exacta de la ecuación en diferencias finitas, esto nos permitirá estudiar la convergencia.

### 1.4. Tratamiento descriptivo de la convergencia

Las condiciones en las cuales  $u \rightarrow U$  aún no son conocidas para ecuaciones lineales en general, excepto en algunos casos particulares.

La ecuación:

$$aU_{xx} + bU_{xt} + cU_{tt} + dU_x + eU_t + fU + g = 0$$

es lineal, cuando  $a, b, c, d, e, f, g$  son funciones de  $x$  y  $t$ .

Si solamente los coeficientes de las derivadas de 2º orden son funciones de  $x, t$  y los otros no; esto es,  $d, e, f$  y  $g$  son funciones de  $x, t, U, U_x, U_t$ , la ecuación es dicha de cuasi-lineal.

Lo mas importante de las ecuaciones lineales es que la suma de soluciones independientes también es una solución.

**Definición 1.2** Sea  $U = U(x, t)$  la solución exacta de la EDP y  $u$  la solución exacta de las ecuaciones en diferencias finitas para aproximar la EDP, entonces la solución de las ecuaciones en diferencias finitas es llamada de convergente si:

$$u \rightarrow U \text{ cuando } h, k \rightarrow 0$$

**Definición 1.3** La diferencia  $(U - u)$  es llamada de error de la discretización, algunos autores la denominan de error de truncamiento; en nuestro caso, nosotros nos reservaremos ese término para la diferencia entre la ecuación diferencial y la aproximación en diferencias finitas.

## 1.5. Tratamiento descriptivo de la estabilidad

Al resolver una EDP mediante las ecuaciones en diferencias finitas, si fuese posible llevar a cabo todos los cálculos para un número infinito de decimales, podremos obtener su solución exacta  $u$ . Pero, en la práctica, cada cálculo arrastra un número finito de decimales, un procedimiento para introducir un error de redondeo es usado en cada paso, y la solución  $u_N$  que es calculada es llamada de solución numérica.

**Definición 1.4** Generalmente un conjunto de ecuaciones en diferencias finitas es estable, cuando el efecto acumulativo de todos los errores introducidos en los nodos (de la malla)  $P_{1,1}, P_{1,2}, \dots, P_{p,q}$ , respectivamente,  $|e_{1,1}|, |e_{1,2}|, \dots, |e_{p,q}|$  son menores que algún  $\delta$ .

Definimos el error de estabilidad:

$$e = u - u_N \tag{1.13}$$

o entonces las ecuaciones en diferencias finitas son estables, cuando:

$$\text{máx}\{u - u_N\}_{p,q} \rightarrow 0, \text{ cuando } \delta \rightarrow 0,$$

y cuando no aumenta con  $q$  para todo  $p$ .

Usualmente no es posible determinar la magnitud exacta de  $(u - u_N)$  en cada nodo  $(ph, qk)$  para una distribución arbitraria de errores, pero existen métodos estándares para obtener una estimativa en casos especiales, los cuales son errores aislados o una suma de filas de errores.

Las soluciones numéricas son invariables, pero necesitan de las estimativas indicadas, por esto, los análisis de estabilidad siempre suponen que todos los errores tienen los mismos signos, lo que no suele ser muy práctico.

La consistencia del operador  $T_h$  garantiza una buena aproximación de la ecuación  $T[u](x, t) = 0$  por la ecuación de diferencias  $T_h[u](x_p, t_q) = 0$ , lo que no implica necesariamente que también las soluciones de estas ecuaciones se aproximen.

Existen, por ejemplo, ecuaciones de diferencias  $T_h[u] = 0$ , cuya solución, para una pequeña variación en las condiciones iniciales o en el propio operador, sufren variaciones "arbitrariamente grandes" (a pesar que  $h$  es suficientemente pequeño); tales ecuaciones son llamadas de inestables.



Veamos un ejemplo:

Consideremos la siguiente ecuación diferencial ordinaria con condiciones iniciales:

$$\begin{cases} u'(x) + u(x) = 0 \\ u(0) = 1 \end{cases}$$

la cual tiene como solución exacta a la función:

$$u(x) = e^{-x}$$

El operador para este problema con condiciones iniciales es definido de la siguiente manera:

$$\begin{cases} T(u) = \frac{\partial u}{\partial x} + u = 0 \\ u(0) = 1 \end{cases} \quad (1.14)$$

y su correspondiente operador de aproximación:

$$\begin{cases} T_h[u_p] = \frac{-u_{p+1} + 4u_p - 3u_{p-1}}{2h} + u_p = 0 \\ u_0 = 1 \\ u_1 = n_1 \end{cases} \quad (1.15)$$

donde  $n_1 = u(h)$ .

Tenemos que  $T_h$  es consistente con  $T$ .

En efecto, supongamos que  $u$  es solución exacta de (1.14), expandiendo  $u$  adecuadamente, por el teorema de Taylor, tenemos:

$$u_{p+1} = \left( u + h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_p + O(h^3) \quad (1.16)$$

$$u_{p-1} = \left( u - h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_p + O(h^3) \quad (1.17)$$

haciendo un uso adecuado de las ecuaciones (1.16) y (1.17), tendremos:

$$-u_{p+1} + 4u_p - 3u_{p-1} = - \left( u + h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_p + 4u_p - 3 \left( u - h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_p + O(h^3)$$

entonces:

$$\frac{-u_{p+1} + 4u_p - 3u_{p-1}}{2h} = \left( \frac{\partial u}{\partial x} - h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_p + O(h^2)$$

sumando  $u_p$  a esta ultima ecuación:

$$\frac{-u_{p+1} + 4u_p - 3u_{p-1}}{2h} + u_p = \left( u + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_p + O(h)$$

lo que es lo mismo:

$$T_h[u_p] - T(u_p) = O(h)$$

de esta manera se tiene la consistencia de  $T_h$ .

Ahora resolveremos (1.15) en el nodo  $x = ph$ , es decir, para  $u_p = u(ph)$ , de (1.15) tenemos:

$$\begin{cases} u_{p+1} - (4 + 2h)u_p + 3u_{p-1} = 0 \\ u_0 = 1 \\ u_1 = n_1 \end{cases} \quad (1.18)$$

buscando soluciones de la forma:

$$u_p = cr^p$$

sustituyendo en (1.18):

$$cr^{p+1} - (4 + 2h)cr^p + 3cr^{p-1} = 0$$

entonces:

$$r^2 - (4 + 2h)r + 3 = 0$$

que tiene como solución las raíces:

$$r = (2 + h) \pm \sqrt{1 + 4h + h^2}$$

así las solución general es:

$$u_p = c_1 r_1^p + c_2 r_2^p \quad (1.19)$$

donde  $r_1$  y  $r_2$  son raíces de la ecuación características.

La raíz:

$$r_1(h) = (2 + h) + \sqrt{1 + 4h + h^2}$$

puede ser expresada como:

$$r_1(h) = 3e^h + O(h^2) \quad (1.20)$$

Esto es posible, haciendo la expansión de Taylor para cada función  $f(x) = \sqrt{x}$  en una vecindad del nodo  $x = 1$  y radio  $4h + h^2$

$$f(1 + 4h + h^2) = f(1) + (4h + h^2)f'(1) + O((4h + h^2)^2)$$

es decir:

$$\sqrt{1 + 4h + h^2} = 1 + (4h + h^2)\frac{1}{2} + O(h^2)$$

luego:

$$(2 + h) + \sqrt{1 + 4h + h^2} = 3 + 3h + O(h^2) \quad (1.21)$$

y de la expansión:

$$e^h = 1 + h + \frac{h^2}{2} + ..$$

De (1.21) tenemos:

$$r_1(h) = (2 + h) + \sqrt{1 + 4h + h^2} = 3e^h + O(h^2) . \quad (1.22)$$

Razonando de manera análoga para obtener una expresión semejante para  $r_2(h)$ , tendremos:

$$\begin{aligned} (2 + h) - \sqrt{1 + 4h + h^2} &= -1 - \frac{1}{2}(4h + h^2) + (2 + h) + O(h^2) \\ &= 1 - h + O(h^2) \end{aligned}$$

Así:

$$r_2(h) = e^{-h} + O(h^2) \quad (1.23)$$

de las condiciones iniciales:

$$u_0 = 1$$

$$u_1 = n_1$$

de (1.19):

$$1 = c_1 r_1^0 + c_2 r_2^0$$

$$n_1 = c_1 r_1 + c_2 r_2$$

resolviendo obtenemos:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{r_2 - n_1}{r_2 - r_1} \\ c_2 &= \frac{r_1 - n_1}{r_1 - r_2} \end{aligned}$$

sustituyendo el valor de estas constantes en la ecuación (1.19):

$$u_p = \frac{r_2 - n_1}{r_2 - r_1} (3e^h + O(h^2))^p + \frac{r_1 - n_1}{r_1 - r_2} (e^{-h} + O(h^2))^p$$

y por lo tanto:

$$u_p = \frac{r_2 - n_1}{r_2 - r_1} 3^p e^{ph} + \frac{r_1 - n_1}{r_1 - r_2} e^{-ph} + O(h^2)$$

como  $x_p = ph$ , tenemos:

$$u_p = \left( \frac{r_2 - n_1}{r_2 - r_1} \right) 3^{\frac{x_p}{h}} e^{x_p} + \left( \frac{r_1 - n_1}{r_1 - r_2} \right) e^{-x_p} + O(h^2) \quad (1.24)$$

para  $n_1 = r_2$ , la ecuación (1.24) se aproxima de la solución exacta de la ecuación (1.14) en el nodo  $x_p$  con un error del orden  $h^2$ .

Pero, si  $n_1$  difiere “ligeramente” del valor de  $r_2$ , lo que puede ocurrir por efectos del redondeo, entonces obtendremos soluciones (ecuación (1.24)) que para  $h$  “suficientemente pequeño” divergen arbitrariamente de  $e^{-x_p}$ ; por esto el procedimiento (1.18) es dicho de inestable.

Note que la inestabilidad es debido al primer término del lado derecho de (1.24):

$$3^{\frac{x_p}{h}}$$

Pues cuando  $h \rightarrow 0$ ,  $3^{\frac{x_p}{h}}$  crece, haciendo que la diferencia:

$$u - u_p$$

no quede acotada.

Por lo tanto la existencia de un método numérico, a pesar de ser convergente para la solución de una EDP, no implica necesariamente que la solución o su buena aproximación numérica pueda ser calculada por este método.

Esta contradicción aparentemente puede ser explicada con el ejemplo tratado anteriormente; el procedimiento (1.18) converge cuando  $h \rightarrow 0$  y  $n_1 = r_2$  para la solución  $u(x) = e^{-x}$  de la ecuación diferencial (1.14), pero el no puede ser usado en la practica para determinar buenas aproximaciones de  $u(x)$ , pues, como hemos mostrado arriba, para  $h$  pequeño estas aproximaciones son distorsionadas por errores de redondeo inevitables.

Es decir, un método de discretización solo tiene utilidad practica cuando la influencia de los errores queda limitada para cualquier valor de los parámetros de la discretización (los pasos  $h$  y  $k$ ); así, llamamos este procedimiento de estable.

Conclusion, la estabilidad es la propiedad que nos permite la aplicación practica de un método o esquema de aproximación.

Tenemos dos maneras clásicas de estudiar el crecimiento de los errores en las operaciones necesarias para resolver las ecuaciones en diferencias finitas. En una expresamos la ecuaciones en la forma matricial y estudiamos los autovalores asociados a la matriz, en la otra usamos series de Fourier.

El método de Fourier es mas simple, pues evita todo conocimiento sobre al algebra de matrices, pero es menos riguroso por que se descuida de la influencia de las condiciones de frontera. Este método solo se aplica exitosamente para problemas de valores iniciales con datos iniciales periódicos, y si los coeficientes de las ecuaciones en diferencias son constante, ver [6], algunos ejemplos también pueden ser vistos en [9].

**Definición 1.5** *Las ecuaciones en diferencias finitas son llamadas de incondicionalmente estable si ellas son estables para cualquier parámetro de discretización en sus respectivas variables.*

**Definición 1.6** *El error total es la cantidad por la cual la solución numérica de la ecuación en diferencias finitas difiere de la solución de la EDP, es decir:*

$$e_T = (U - u_N) = (U - u) + (u - u_N)$$

$$e_T = \text{error de discretización} + \text{error de estabilidad}$$

*donde  $U$  es la solución exacta de la EDP.*

Estudios numéricos parecen indicar que el error de la discretización es mas dominante en un proceso estable y convergente.

# Capítulo 2

## Análisis de los esquemas

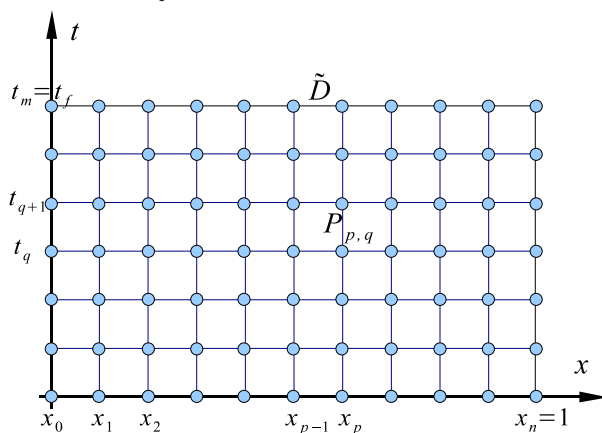
Ahora haremos un análisis para dos esquemas que emplearemos en la búsqueda de la solución aproximada para nuestra EDP.

Trabajaremos inicialmente en el caso de  $n = 1$ , así el problema puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \text{ en } (0, 1) \times (0, \infty) \\ u(1, t) = 0 \quad , \text{ para todo } t \in (0, \infty) \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = -\alpha \frac{\partial u}{\partial t} \quad , \text{ para todo } t \in (0, \infty) \text{ , } \alpha > 0 \\ u(x, 0) = f(x) \quad , \text{ para todo } x \in (0, 1) \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Para diseñar nuestra malla, haremos lo siguiente, subdividimos el intervalo  $[0,1]$  en la variable  $x$  en  $n$  partes iguales, así obtendremos  $n + 1$  nodos uniformemente equidistantes, luego el tamaño del paso en esta variable será  $h = \frac{1}{n}$ , de esta manera los nodos generados conformarán el conjunto:

$$\{x_p = ph ; p = 0, 1, \dots, n\}$$



De manera análoga haremos lo mismo con la variable  $t$ , fijamos un  $t = t_f$  y dividimos el intervalo  $[0, t_f]$  en  $m$  partes iguales para generar los respectivos nodos en esta variable, así obtenemos  $m + 1$  nodos y el valor del tamaño de paso  $k = \frac{t_f}{m}$ . Los nodos generados serán de la forma:

$$\{t_q = qk ; q = 0, 1, \dots, m\}$$

Así, el problema aproximado en diferencias finitas será estudiado en el dominio discreto:

$$\tilde{D} = \{(ph, qk) ; p = 0, 1, \dots, n ; q = 0, 1, \dots, m\}$$

El siguiente teorema será útil al estudiar la estabilidad del problema aproximado.

**Teorema 2.1** *Supongamos que el esquema en diferencias finitas para una EDP pueda ser escrito de la forma siguiente:*

$$u_{q+1} = Qu_q , \text{ para todo } q \geq 0 \tag{2.2}$$

*entonces este esquema es estable si solo si los autovalores de la matriz  $Q$  en módulo son menores o iguales a 1.*

**Demostración:**

De (2.2) tenemos que:

$$\begin{aligned} u_1 &= Qu_0 \\ u_2 &= Qu_1 = Q(Qu_0) = Q^2u_0 \\ u_3 &= Q^3u_0 \\ &\vdots \\ u_{q-1} &= Q^{q-1}u_0 \end{aligned}$$

así:

$$u_q = Q^q u_0 , \text{ para todo } q \geq 0 \tag{2.3}$$

donde  $u_0$  es un vector de valor inicial:

$$u_0 = (u_{1,0}, u_{2,0}, \dots, u_{n,0})$$

Ahora denotemos la solución numérica como:

$$u_N = u^*$$

Y suponga introducidos errores en cada nodo a lo largo de  $t = 0$ , e iniciamos el cálculo con el vector inicial  $u_0^*$  en lugar de  $u_0$ , entonces:

$$u_1^* = Qu_0^*$$

luego:

$$u_2^* = Qu_1^* = Q^2u_0^*$$

$$u_3^* = Q^3u_0^*$$

⋮

$$u_{q-1}^* = Q^{q-1}u_0^*$$

luego:

$$u_q^* = Q^q u_0^* , \text{ para todo } q \geq 1 \tag{2.4}$$

De la definición (1.13), el vector error:

$$e = u - u^*$$

Así en la  $q$ -ésima línea tendremos:

$$e_q = u_q - u_q^*$$

sustituyendo las ecuaciones (2.3) y (2.4) en esta última ecuación, se tiene:

$$\begin{aligned} e_q &= Q^q u_0 - Q^q u_0^* \\ &= Q^q (u_0 - u_0^*) \\ &= Q^q e_0 \end{aligned}$$

luego:

$$e_q = Q^q e_0 , \text{ para todo } q \geq 0 \tag{2.5}$$

donde  $e_0$  es el error inicial.

Lo que muestra que la fórmula de propagación de los errores es la misma para el cálculo de  $u$ .

Esto también demuestra que cuando las ecuaciones en diferencias finitas son lineales, solo precisamos considerar la propagación de una línea de errores, por que el efecto completo de varias líneas puede ser expresado por la suma de los efectos producidos por cada línea considerada separadamente.

De la definición de estabilidad, el esquema en diferencias finitas es estable, cuando  $e_q$  queda acotado, independientemente de  $q$ , es decir:

$$|e_q| \leq c , \text{ para todo } q \geq 0$$

Esto puede ser estudiado expresando el vector error en términos de los autovalores de la matriz  $Q$ .



Entonces, sea:

$$\{\lambda_s ; s = 1, 2, \dots, n\}$$

el conjunto de autovalores de  $Q$ .

Supongamos que todos sean diferentes y denotemos por  $v_s$  a los vectores asociados, es decir:

$$Qv_s = \lambda_s v_s, \text{ para todo } s = 1, 2, \dots, n$$

entonces el conjunto:

$$\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$$

es un conjunto linealmente independiente.

Luego el vector  $e_0$  puede ser escrito como:

$$e_0 = \sum_{s=1}^n c_s v_s$$

donde  $c_s$  son escalares.

Escribiendo explícitamente:

$$\begin{pmatrix} e_{1,0} \\ e_{2,0} \\ \vdots \\ e_{n,0} \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} v_{1,1} \\ v_{2,1} \\ \vdots \\ v_{n,1} \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} v_{1,2} \\ v_{2,2} \\ \vdots \\ v_{n,2} \end{pmatrix} + \dots + c_n \begin{pmatrix} v_{1,n} \\ v_{2,n} \\ \vdots \\ v_{n,n} \end{pmatrix}$$

Los errores a lo largo de la primera línea ( $q = 1$ ) son:

$$e_1 = Qe_0 = Q \sum_{s=1}^n c_s v_s = \sum_{s=1}^n c_s Qv_s = \sum_{s=1}^n (c_s \lambda_s) v_s$$

análogamente, en la  $q$ -ésima línea tenemos:

$$e_q = Q^q e_0 = \sum_{s=1}^n c_s Q^q v_s = \sum_{s=1}^n (c_s \lambda_s^q) v_s$$

por lo tanto:

$$e_q = \sum_{s=1}^n c_s \lambda_s^q v_s, \text{ para todo } q \geq 1$$

empleando las propiedades de norma:

$$\begin{aligned}
|e_q| &= \left| \sum_{s=1}^n c_s \lambda_s^q v_s \right| \\
&\leq \sum_{s=1}^n |c_s \lambda_s^q v_s| \\
&= \sum_{s=1}^n |c_s| |\lambda_s^q| |v_s|
\end{aligned}$$

considerando las cotas:

$$\begin{aligned}
C &= \max_{1 \leq s \leq n} \{ |c_s| \} \\
|\lambda| &= \max_{1 \leq s \leq n} \{ |\lambda_s| \} \\
w &= \max_{1 \leq s \leq n} \{ |v_s| \}
\end{aligned}$$

obtendremos:

$$\begin{aligned}
|e_q| &\leq \sum_{s=1}^n Cw |\lambda_s|^q, \text{ para todo } q \geq 1 \\
&\leq Cw |\lambda|^q \sum_{s=1}^n 1, \text{ para todo } q \geq 1 \\
&\leq nCw |\lambda|^q, \text{ para todo } q \geq 1
\end{aligned}$$

Esto demuestra que el error no crece exponencialmente con  $q$  cuando:

$$|\lambda_s| \leq 1, \text{ para todo } s = 1, 2, \dots, n \quad \blacksquare \quad (2.6)$$

**Observación 2.1** *La demostración de la recíproca del Teorema 2.1 es fácilmente obtenida suponiendo, por el absurdo, la existencia de un autovalor con módulo estrictamente mayor que 1.*

El siguiente resultado permite garantizar la convergencia de los esquemas en diferencias finitas.

**Teorema 2.2 (Equivalencia de Lax)** *En el método de las ecuaciones en diferencias finitas, estabilidad y consistencia implican convergencia.*

**Demostración:**

Escribiendo el método de diferencias finitas  $T_h[u] = 0$  en su forma matricial, tendremos:

$$u_{q+1} = Qu_q, \text{ para todo } q \geq 0$$

donde  $Q$  es una matriz cuadrada con coeficientes reales o complejos.

Por la ecuación (2.3), tenemos:

$$u_q = Q^q u_0, \text{ para todo } q \geq 0$$

donde  $u_0$  es el vector de valor inicial.

Sea  $U$  la solución exacta de la EDP, por la definición de la consistencia del método, tenemos que:

$$T_h[U] = \tau[U] \equiv O(h^\theta) + O(k^\omega)$$

Escribiendo  $T_h$  en su forma matricial:

$$kT_h[U] \equiv U_q - QU_{q-1}$$

se tiene que:

$$\begin{aligned} U_q - QU_{q-1} &= k\tau[U] \equiv O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}) \\ U_q &= QU_{q-1} + O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Por la definición (1.3) el vector error (de discretización) es dado por:

$$e = u - U$$

o en cada línea de error:

$$e_q = u_q - U_q, \text{ para todo } q \geq 0$$

y el error inicial:

$$e_0 = u_0 - U_0 = 0$$

de (2.7):

$$\begin{aligned} U_1 &= QU_0 + O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}) \\ U_2 &= QU_1 + O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}) = Q^2U_0 + (Q + I)(O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \\ U_3 &= Q^3U_0 + (Q^2 + Q + I)(O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \\ &\vdots \\ U_q &= Q^qU_0 + \left( \sum_{m=0}^{q-1} Q^m \right) (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \end{aligned}$$

luego:

$$\begin{aligned} e_1 &= u_1 - U_1 = Qu_0 - QU_0 - (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \\ e_1 &= Q(u_0 - U_0) - (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \\ e_1 &= O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}) \end{aligned}$$

también:

$$e_2 = u_2 - U_2 = Q^2 u_0 - Q^2 U_0 + (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}))(Q + I)$$

$$e_2 = (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}))(Q + I)$$

así:

$$e_1 = O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})$$

$$e_2 = (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1}))(Q + I)$$

⋮

$$e_q = (O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})) \sum_{m=0}^{q-1} Q^m, \text{ para todo } q \geq 0$$

entonces:

$$\|e_q\| \leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} \|Q^m\|, \text{ para todo } q \geq 0$$

de la definición de norma de una matriz, tenemos:

$$\|Q^m\| = \max_{v \neq 0} \frac{\|Q^m v\|}{\|v\|}, \text{ para todo } m \geq 1$$

luego:

$$\begin{aligned} \|e_q\| &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} \max_{v \neq 0} \left\{ \frac{\|Q^m v\|}{\|v\|} \right\} \\ &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} \max_{v \neq 0} \left\{ \frac{|\lambda^m| \|v\|}{\|v\|}, \text{ es autovalor de } Q \right\} \\ &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} \max_{v \neq 0} \left\{ \frac{|\lambda^m| \|v\|}{\|v\|}, \text{ es autovalor de } Q \right\} \\ &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} \max\{|\lambda^m|, \lambda \text{ es autovalor de } Q\} \\ &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \sum_{m=0}^{q-1} |\lambda_0^m| \end{aligned}$$

donde:

$$|\lambda_0| = \max\{|\lambda|; \lambda \text{ es un autovalor de } Q\}$$

De la condición de estabilidad y por la observación 2.1, se sigue que:

$$|\lambda_0| \leq 1$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \|e_q\| &\leq |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})|_q \\ &= |O(kh^\theta) + O(k^{\omega+1})| \frac{T}{k} \\ &= |O(h^\theta) + O(k^\omega)| \end{aligned}$$

Como:

$$\tau[U] = O(h^\theta) + O(k^\omega) \rightarrow 0, \text{ cuando } h, k \rightarrow 0$$

Haciendo  $h \rightarrow 0$  siempre que  $k \rightarrow 0$ , se tiene:

$$\|e_q\| \rightarrow 0 \text{ cuando } k \rightarrow 0$$

se tiene:

$$\|e_q\| \rightarrow 0 \quad \blacksquare$$

Demostremos el anterior teorema solamente para el caso en que el problema aproximado puede ser escrito en la forma matricial:

$$u_{q+1} = Qu_q, \text{ para todo } q \geq 0$$

Pero, el teorema aún puede ser aplicado en problemas mas generales, cuyas formas matriciales son:

$$Au_{q+1} = Bu_q + Cu_{q-1}, \text{ para todo } q \geq 1$$

donde  $A$ ,  $B$  y  $C$  son matrices cuadradas, ver [8], [10].

Este teorema será aplicado en la verificación de la convergencia de los esquemas utilizados a seguir.

Implementaremos dos esquemas clásicos para resolver nuestro problema (2.1), con ligeras variaciones debidas a la influencia de las condiciones de frontera de nuestro problema, como se podrá verificar mas adelante.

## 2.1. Esquema implícito

El operador de aproximación  $T_h$  en diferencias finitas implícitas para (2.1) es:

$$T_h[u_{p,q}] = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1} = \left( \frac{\partial u}{\partial t} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+1} \quad (2.8)$$

así:

$$T_h[u_{p,q}] = \frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} - \frac{i}{h^2} (u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1})$$

Y por lo tanto, la ecuación (2.1) es aproximada por la ecuación en diferencias:

$$\frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} = \frac{i}{h^2} (u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}) \quad (2.9)$$

Analicemos ahora cuáles son las condiciones para que este sea un esquema estable.

### 2.1.1. Estabilidad

La ecuación (2.9) puede ser expresada como:

$$-ru_{p-1,q+1} + (1 + 2r)u_{p,q+1} - ru_{p+1,q+1} = u_{p,q} \quad (2.10)$$

donde:

$$r = i \frac{k}{h^2}$$

de las condiciones de frontera de (2.1), en  $x = 0$ , tenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = -\alpha \frac{\partial u}{\partial t}(0, t) \quad (2.11)$$

aproximando estas derivadas con sus respectivas ecuaciones en diferencias:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t_{q+1}) = \frac{u_{1,q+1} - u_{-1,q+1}}{2h} \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0, t_{q+1}) = \frac{u_{0,q+1} - u_{0,q}}{k} \quad (2.13)$$

En la diferencia centrada (2.12), introducimos el termino ficticio  $u_{-1,q+1}$  y suponemos que la ecuación (2.1) es válida en el nodo  $(-1, q + 1)$ ; luego este valor ficticio será eliminado algebraicamente, esto es hecho para conseguir mas de una ecuación algebraica para nuestro sistema de ecuaciones que después será resuelta.

Sustituyendo las ecuaciones (2.12) y (2.13) en (2.11):

$$\frac{u_{1,q+1} - u_{-1,q+1}}{2h} = -\frac{\alpha}{k} (u_{0,q+1} - u_{0,q})$$

así:

$$u_{1,q+1} - u_{-1,q+1} = -2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q+1} + 2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q}$$

entonces:

$$u_{-1,q+1} = -2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q} + 2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q+1} + u_{1,q+1} \quad (2.14)$$

ahora, para  $p = 0$  en (2.10), obtenemos:

$$-ru_{-1,q+1} + (1 + 2r)u_{0,q+1} - ru_{1,q+1} = u_{0,q} \quad (2.15)$$

sustituyendo (2.14) en (2.15):

$$-r \left( -2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q} + 2\frac{\alpha h}{k}u_{0,q+1} + u_{1,q+1} \right) + (1 + 2r)u_{0,q+1} - ru_{1,q+1} = u_{0,q}$$

de esto:

$$\left( 1 + 2r - 2\frac{\alpha hr}{k} \right) u_{0,q+1} - 2ru_{1,q+1} = \left( 1 - 2\frac{\alpha hr}{k} \right) u_{0,q}$$

entonces:

$$\left( \frac{1 + 2r - 2\frac{\alpha hr}{k}}{1 - 2\frac{\alpha hr}{k}} \right) u_{0,q+1} - \left( \frac{2r}{1 - 2\frac{\alpha hr}{k}} \right) u_{1,q+1} = u_{0,q}$$

así, para  $p = 0$  tendremos:

$$au_{0,q+1} + bu_{1,q+1} = u_{0,q} \quad , \quad p = 0 \quad (2.16)$$

donde:

$$a = \left( \frac{1 + 2r - 2\frac{\alpha hr}{k}}{1 - 2\frac{\alpha hr}{k}} \right)$$

$$b = - \left( \frac{2r}{1 - 2\frac{\alpha hr}{k}} \right)$$

luego

$$a + b = 1 \quad ; \quad a, b \in \mathbb{C}$$

cuando  $p = n - 1$ , en la ecuación (2.10):

$$-ru_{n-2,q+1} + (1 + 2r)u_{n-1,q+1} - ru_{n,q+1} = u_{n-1,q} \quad , \quad \text{para todo } q \geq 0 \quad (2.17)$$

de la condición de frontera:

$$u(x, t) = 0 \quad , \quad \text{cuando } x = 1$$

Como  $x_p = 1$  cuando  $p = n$ , entonces:

$$u_{n,q} = 0, \text{ para todo } q \geq 0 \quad (2.18)$$

luego, sustituyendo (2.18) en (2.17):

$$-ru_{n-2,q+1} + (1+2r)u_{n-1,q+1} = u_{n-1,q}, \text{ para todo } q \geq 0 \quad (2.19)$$

así, de (2.16), (2.10) y (2.19), tenemos que para todo  $q \geq 0$ :

$$\begin{cases} au_{0,q+1} + bu_{1,q+1} = u_{0,q} \\ -ru_{p-1,q+1} + (1+2r)u_{p,q+1} - ru_{p+1,q+1} = u_{p,q} ; p = 1, 2, \dots, n-2 \\ -ru_{n-2,q+1} + (1+2r)u_{n-1,q+1} = u_{n-1,q} \end{cases}$$

este sistema de ecuaciones escrito en la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a & b & & & & & \\ -r & (1+2r) & -r & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & -r & (1+2r) & -r \\ & & & & & -r & (1+2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{0,q+1} \\ u_{1,q+1} \\ \vdots \\ u_{n-2,q+1} \\ u_{n-1,q+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{0,q} \\ u_{1,q} \\ \vdots \\ u_{n-2,q} \\ u_{n-1,q} \end{pmatrix}$$

Por lo tanto:

$$Au_{q+1} = u_q, \text{ para todo } q \geq 0 \quad (2.20)$$

donde,  $A$  es una matriz tridiagonal de orden  $n$ , y:

$$u_q = \begin{pmatrix} u_{0,q} \\ u_{1,q} \\ \vdots \\ u_{n-2,q} \\ u_{n-1,q} \end{pmatrix}$$

Luego:

$$u_{q+1} = Qu_q, \text{ para todo } q \geq 0$$

donde:

$$Q = A^{-1}, \text{ si } A \text{ es inversible}$$



Entonces, de acuerdo con el teorema 2.1, será suficiente que los autovalores de  $A$  en módulo sean mayores o iguales a 1, para poder garantizar la estabilidad del esquema.

A pesar de utilizar teoremas clásicos (vea el apéndice A) para disponer de los módulos de los autovalores de la matriz  $A$ , no conseguimos probar analíticamente que estos módulos fuesen mayores o iguales a uno.

Abajo, presentamos una estimativa numérica, la cual nos permite verificar, para algunos valores de  $r = i \frac{k}{h^2}$  que el módulo de los autovalores no son menores que uno.

Para obtener los autovalores de la matriz  $A$ , utilizamos el software `Octave`, que usa la función `eig()` para calcular los autovalores de una matriz cuadrada, esta herramienta está incluida en la biblioteca de funciones, la cuál está basada en el conjunto de rutinas de `Lapack`<sup>1</sup>. La Tabla (2.1) se ha obtenido haciendo variar los valores de  $h = \frac{1}{10}, \frac{1}{20}, \frac{1}{30}$  y de  $k = \frac{1}{100}, \frac{1}{200}, \dots, \frac{1}{1000}$ .

Así, para cada valor de  $h$  y  $k$  mostramos los respectivos valores de  $|r|$ ,  $|\lambda_{min}|$  y  $|\lambda_{max}|$ , donde:

$$|\lambda_{min}| = \min\{|\lambda_s|, \lambda_s \text{ autovalor de } A\}$$

$$|\lambda_{max}| = \max\{|\lambda_s|, \lambda_s \text{ autovalor de } A\}$$

Como se puede observar en la tabla 2.1 los autovalores son mayores que 1 con un error del orden de 2 en  $|\lambda_{min}|$ . Atribuimos este resultado al elevado orden de las matrices respectivas y al riesgo del desbordamiento de los errores en las respectivas rutinas de aproximación, por ejemplo  $h = \frac{1}{30}$  implica una matriz de orden 30.

Tabla 2.1: Autovalores de  $A$

$k$	$h = \frac{1}{10}$			$h = \frac{1}{20}$			$h = \frac{1}{30}$		
	$ r $	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $	$ r $	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $	$ r $	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $
0.1000	10.00	1.039685	41.678665	40.00	1.034623	158.983247	90.00	1.033033	358.992464
0.0500	5.00	1.009927	25.733723	20.00	1.008727	83.339333	45.00	1.008341	179.498053
0.0333	3.33	1.004380	20.441142	13.33	1.003874	62.059339	30.00	1.003709	125.003999
0.0250	2.50	1.002448	17.805881	10.00	1.002174	51.438293	22.50	1.002084	101.057579
0.0200	2.00	1.001558	16.230835	8.00	1.001388	45.077760	18.00	1.001332	86.705767
0.0167	1.67	1.001077	15.184479	6.67	1.000962	40.845576	15.00	1.000924	77.149338
0.0143	1.43	1.000788	14.439431	5.71	1.000706	37.828346	12.86	1.000678	70.331785
0.0125	1.25	1.000602	13.882218	5.00	1.000539	35.569615	11.25	1.000519	65.225058
0.0111	1.11	1.000474	13.449925	4.44	1.000426	33.815959	10.00	1.000410	61.258163
0.0100	1.00	1.000383	13.104876	4.00	1.000344	32.415428	9.00	1.000331	58.088608

La búsqueda también se realizó para otros valores de  $h$  y de  $k$  mas pequeños, verificándose la mencionada propiedad sin inconvenientes.

<sup>1</sup>`Lapack` integra las librerías `Linpack` y `Eispack`, las cuales permiten resolver problemas de sistemas de ecuaciones lineales y de autovalores respectivamente.

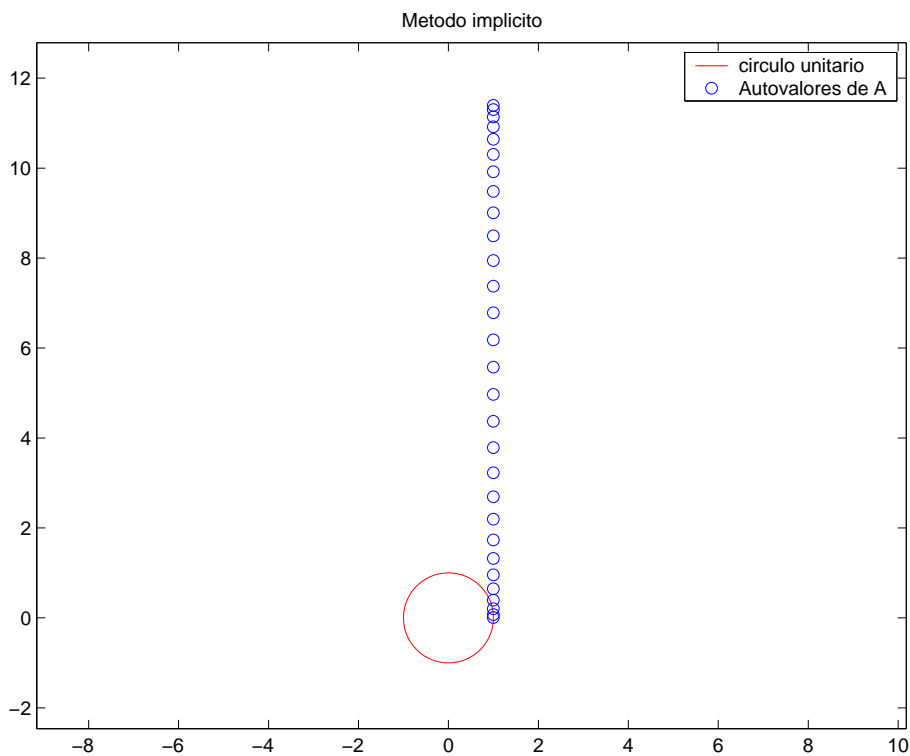
Visto que no obtuvimos ninguna inestabilidad numérica en la practica, podemos considerar el esquema de estable.

En la figura 2.1, se muestra la localización de los autovalores con respecto al círculo unitario, en este caso se ha considerado 31 nodos en la variable  $x$  y 3151 nodos en la variable  $t$ , lo que es equivalente a  $n = 31$ ,  $h = \frac{1}{30}$ ,  $k = \frac{1}{3150}$  y  $|r| = 1.43$

Una particularidad percibida en este esquema, es que al hacer las estimativas numéricas para obtener los autovalores, estos siempre se encuentran sobre una recta tangente al círculo unitario, ver la figura 2.1, esto siempre se obtuvo para otros valores de  $r, h$  y  $k$  considerados.

A pesar de no haber podido establecer el conjunto de valores de  $r$  para el cual el módulo de los autovalores de  $A$  son mayores o iguales a uno, verificamos que esta condición es satisfecha para algún  $r$ , y así, utilizando el teorema 2.1, garantizar la estabilidad del esquema.

Figura 2.1: Autovalores de  $A$  con respecto al círculo unitario



Ahora veamos el estudio de la consistencia para este esquema.

### 2.1.2. Consistencia

Supongamos que  $u$  sea la solución exacta de la ecuación diferencial en (2.1) y que ella tenga derivadas continuas, entonces haciendo uso del teorema de Taylor en la variable  $t$ :

$$u_{p,q} = \left( u - k \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \dots \right) \Big|_{p,q+1}$$

luego:

$$u_{p,q} - u_{p,q+1} = \left( -k \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) \Big|_{p,q+1} + O(k^3)$$

así:

$$\frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1} + O(k) \quad (2.21)$$

Ahora en la variable  $x$ :

$$u_{p-1,q+1} = \left( u - h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \right) \Big|_{p,q+1}$$

$$u_{p+1,q+1} = \left( u + h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \right) \Big|_{p,q+1}$$

luego:

$$u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1} = \left( h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2 \frac{h^4}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots \right) \Big|_{p,q+1}$$

así:

$$\frac{u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}}{h^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1} + O(h^2) \quad (2.22)$$

de (2.21) e (2.22):

$$\frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} - \frac{i}{h^2} (u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}) = \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{p,q+1} + O(k) - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p,q+1} + O(h^2)$$

luego:

$$T_h[u_{p,q}] = \left( \frac{\partial u}{\partial t} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+1} + O(k) + O(h^2)$$

Como  $u$  es solución exacta de  $T$ , tenemos:

$$T[u_{p,q}] = \left( \frac{\partial u}{\partial t} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+1} = 0$$

en cualquier nodo  $(p, q + 1)$ . Así:

$$T_h[u_{p,q}] = O(k) + O(h^2)$$

es decir  $T_h$  tiene orden de consistencia 1. ■

### 2.1.3. Convergencia

En la sección 2.1.1 concluimos que el método implícito (2.9) es estable para un conjunto de valores de  $r$  y en la sección 2.1.2 probamos la consistencia de este método, por lo tanto, por el teorema de Lax, el esquema es convergente. ■

## 2.2. Esquema de Crank-Nicolson

El correspondiente esquema de Crank-Nicolson para la ecuación de Schrödinger es:

$$T_h[u_{p,q}] = i \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) \Big|_{p,q+1} + \frac{1}{2} \left( \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+1} + \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q} \right) = 0$$

o también:

$$T_h[u_{p,q}] = \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) \Big|_{p,q+1} - \frac{i}{2} \left( \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+1} + \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q} \right) = 0 \quad (2.23)$$

después de haber sustituido las respectivas aproximaciones en diferencias finitas, tenemos que para todo  $p, q \geq 0$ :

$$\frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} = \frac{i}{2h^2} \left( (u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}) + (u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}) \right) \quad (2.24)$$

si  $r = \frac{ik}{2h^2}$ , entonces de (2.24) tenemos:

$$u_{p,q+1} - u_{p,q} = r(u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}) + r(u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q})$$

luego:

$$-ru_{p-1,q+1} + (1 + 2r)u_{p,q+1} - ru_{p+1,q+1} = ru_{p-1,q} + (1 - 2r)u_{p,q} + ru_{p+1,q} \quad (2.25)$$

### 2.2.1. Estabilidad

De la condición de frontera, en  $x = 0$ , tenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = -\alpha \frac{\partial u}{\partial t}(0, t) \quad (2.26)$$

Haremos uso de la diferencia regresiva para aproximar  $\frac{\partial u}{\partial t}$  y de la diferencia progresiva para  $\frac{\partial u}{\partial x}$  en los puntos  $(0, t_{q+1})$  para todo  $q \geq 0$ .

Veamos:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t_{q+1}) = \frac{u_{1,q+1} - u_{0,q+1}}{h}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0, t_{q+1}) = \frac{u_{0,q+1} - u_{0,q}}{k}$$

Sustituyendo estas ecuaciones en la ecuación (2.26), tenemos:

$$\frac{u_{1,q+1} - u_{0,q+1}}{h} = -\frac{\alpha}{k}(u_{0,q+1} - u_{0,q})$$

luego:

$$u_{1,q+1} + \left(\frac{\alpha h}{k} - 1\right) u_{0,q+1} = \frac{\alpha h}{k} u_{0,q}$$

así obtenemos:

$$u_{0,q} = \left(1 - \frac{k}{\alpha h}\right) u_{0,q+1} + \frac{k}{\alpha h} u_{1,q+1} \quad , \quad p = 0 \quad (2.27)$$

Ahora, para  $p = n - 1$ :

$$-ru_{n-2,q+1} + (1 + 2r)u_{n-1,q+1} - ru_{n,q+1} = ru_{n-2,q} + (1 - 2r)u_{n-1,q} + ru_{n,q} \quad (2.28)$$

de la condición de frontera:

$$u(x, t) = 0 \quad , \quad x = 1$$

tenemos:

$$u_{n,q} = 0 \quad , \quad \text{para todo } q \geq 0 \quad (2.29)$$

sustituyendo (2.29) en (2.28):

$$-ru_{n-2,q+1} + (1 + 2r)u_{n-1,q+1} = ru_{n-2,q} + (1 - 2r)u_{n-1,q} \quad (2.30)$$

luego, de las ecuaciones (2.27), (2.25) y (2.30) tendremos:

$$\begin{cases} \left(1 - \frac{k}{\alpha h}\right) u_{0,q+1} + \frac{k}{\alpha h} u_{1,q+1} = u_{0,q} \\ -ru_{p-1,q+1} + (1 + 2r)u_{p,q+1} - ru_{p+1,q+1} = ru_{p-1,q} + (1 - 2r)u_{p,q} + ru_{p+1,q} \\ -ru_{n-2,q+1} + (1 + 2r)u_{n-1,q+1} = ru_{n-2,q} + (1 - 2r)u_{n-1,q} \end{cases}$$

así, este sistema de ecuaciones escrito en la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{k}{\alpha h} & \frac{k}{\alpha h} & & & \\ -r & (1+2r) & -r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -r & (1+2r) & -r \\ & & & -r & (1+2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{0,q+1} \\ u_{1,q+1} \\ \vdots \\ u_{n-2,q+1} \\ u_{n-1,q+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & \\ r & (1-2r) & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & (1-2r) & r \\ & & & r & (1-2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{0,q} \\ u_{1,q} \\ \vdots \\ u_{n-2,q} \\ u_{n-1,q} \end{pmatrix}$$

O sea,

$$Au_{q+1} = Bu_q, \text{ para todo } q \geq 0 \quad (2.31)$$

Así:

$$u_{q+1} = Qu_q, \text{ para todo } q \geq 0$$

donde  $Q = A^{-1}B$ , si  $A$  es inversible.

Luego, del teorema 2.1, el esquema será estable si los autovalores de  $Q$  en módulo son menores o iguales que 1, es decir:

$$|\lambda_s| \leq 1; s = 1, 2, \dots, n \quad (2.32)$$

donde  $\lambda_s$  son los autovalores de  $A^{-1}B$ .

De la misma manera que en el método anterior, debido a la dificultad de probar analíticamente este hecho, presentamos una estimativa numérica de que la estabilidad se cumple para cualquier valor de  $r = i \frac{k}{2h^2}$ .

Con un poco de trabajo y paciencia obtenemos la tabla (2.2), ella también fue obtenida haciendo variar  $h = \frac{1}{20}, \frac{1}{30}, \dots, \frac{1}{100}$  y  $k = \frac{1}{100}, \frac{1}{200}, \dots, \frac{1}{1000}$ .

Así, para cada valor de  $h$  y  $k$  mostramos los respectivos valores de  $|r|$ ,  $|\lambda_{min}|$  y  $|\lambda_{max}|$ , donde:

$$|\lambda_{min}| = \min\{|\lambda_s|; \lambda_s \text{ autovalor de } Q\}$$

$$|\lambda_{max}| = \max\{|\lambda_s|; \lambda_s \text{ autovalor de } Q\}$$

En esta tabla tenemos que  $|\lambda_{min}|$  e  $|\lambda_{max}|$  están muy próximos al valor 1.

Tabla 2.2: Autovalores de  $Q = A^{-1}B$ .

$k$	$h = \frac{1}{20}$			$h = \frac{1}{30}$			$h = \frac{1}{40}$		
	$r$	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $	$r$	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $	$r$	$ \lambda_{min} $	$ \lambda_{max} $
0.1000	20.00	0.9243089089	0.9999999746	45.00	0.9000851950	0.9999999987	80.00	0.8880968075	0.9999999999
0.0500	10.00	1.0000000000	1.0000000000	22.50	0.9693553084	0.9999999949	40.00	0.9543700604	0.9999999992
0.0333	6.67	1.000006276	1.0333527430	15.00	1.0000000000	1.0000000000	26.67	0.9839804555	0.9999999987
0.0250	5.00	1.0000028332	1.0522541842	11.25	1.000000395	1.0166373016	20.00	1.0000000000	1.0000000000
0.0200	4.00	1.0000078690	1.0652988896	9.00	1.0000001514	1.0271986339	16.00	1.0000000058	1.0099821005
0.0167	3.33	1.0000170866	1.0753248254	7.50	1.0000003845	1.0347249503	13.33	1.0000000200	1.0168504456
0.0143	2.86	1.0000317299	1.0828796682	6.43	1.0000007968	1.0405771138	11.43	1.0000000470	1.0219462579
0.0125	2.50	1.0000527160	1.0876305289	5.63	1.0000014532	1.0453973454	10.00	1.0000000926	1.0259618655
0.0111	2.22	1.0000804431	1.0892943245	5.00	1.0000024231	1.0494504100	8.89	1.0000001629	1.0292817553
0.0100	2.00	1.0001146694	1.0940248941	4.50	1.0000037771	1.0527809347	8.00	1.0000002650	1.0321243501
0.1000	125.00	0.8809354850	1.0000000000	180.00	0.8761727349	1.0000000000	245.00	0.8727758474	1.0000000000
0.0500	62.50	0.9454483473	0.9999999998	90.00	0.9395211142	1.0000000000	122.50	0.9352949377	1.0000000000
0.0333	41.67	0.9744866812	0.9999999997	60.00	0.9681865742	0.9999999999	81.67	0.9636946982	1.0000000000
0.0250	31.25	0.9902263389	0.9999999996	45.00	0.9837605558	0.9999999998	61.25	0.9791554194	0.9999999999
0.0200	25.00	1.0000000000	1.0000000000	36.00	0.9934318416	0.9999999998	49.00	0.9887647646	0.9999999999
0.0167	20.83	1.0000000014	1.0066565413	30.00	1.0000000000	1.0000000000	40.83	0.9952875754	0.9999999999
0.0143	17.86	1.0000000043	1.0115075975	25.71	1.0000000004	1.0047559472	35.00	1.0000000000	1.0000000000
0.0125	15.63	1.0000000095	1.0152356286	22.50	1.0000000012	1.0083725557	30.63	1.0000000002	1.0035677431
0.0111	13.89	1.0000000180	1.0182283826	20.00	1.0000000026	1.0112334790	27.22	1.0000000004	1.0063707562
0.0100	12.50	1.0000000306	1.0207203074	18.00	1.0000000048	1.0135726919	24.50	1.0000000009	1.0086411949
0.1000	320.00	0.8702307554	1.0000000000	405.00	0.8682526764	1.0000000000	500.00	0.8666710762	1.0000000000
0.0500	160.00	0.9321285105	1.0000000000	202.50	0.9296672363	1.0000000000	250.00	0.9276989754	1.0000000000
0.0333	106.67	0.9603280479	1.0000000000	135.00	0.9577099327	1.0000000000	166.67	0.9556152393	1.0000000000
0.0250	80.00	0.9757046805	1.0000000000	101.25	0.9730208501	1.0000000000	125.00	0.9708729990	1.0000000000
0.0200	64.00	0.9852711487	1.0000000000	81.00	0.9825549959	1.0000000000	100.00	0.9803814119	1.0000000000
0.0167	53.33	0.9917665570	1.0000000000	67.50	0.9890316489	1.0000000000	83.33	0.9868440196	1.0000000000
0.0143	45.71	0.9964560717	1.0000000000	57.86	0.9937075082	1.0000000000	71.43	0.9915107998	1.0000000000
0.0125	40.00	1.0000000000	1.0000000000	50.63	0.9972387011	1.0000000000	62.50	0.9950345567	1.0000000000
0.0111	35.56	1.0000000001	1.0027753909	45.00	1.0000000000	1.0000000000	55.56	0.9977882436	1.0000000000
0.0100	32.00	1.0000000002	1.0050127742	40.50	1.0000000000	1.0022206139	50.00	1.0000000000	1.0000000000

En la tabla se observa que para un rango apreciable de valores de  $h$  y  $k$  y en el caso de  $|\lambda_{max}|$ , el error es del orden 2; por lo que, para efectos prácticos todos ellos pueden considerarse menor o iguales a 1.

Sin embargo no debemos de ignorar que para valores muy pequeños de  $h$  y  $k$  los autovalores tienden a 1 en módulo.

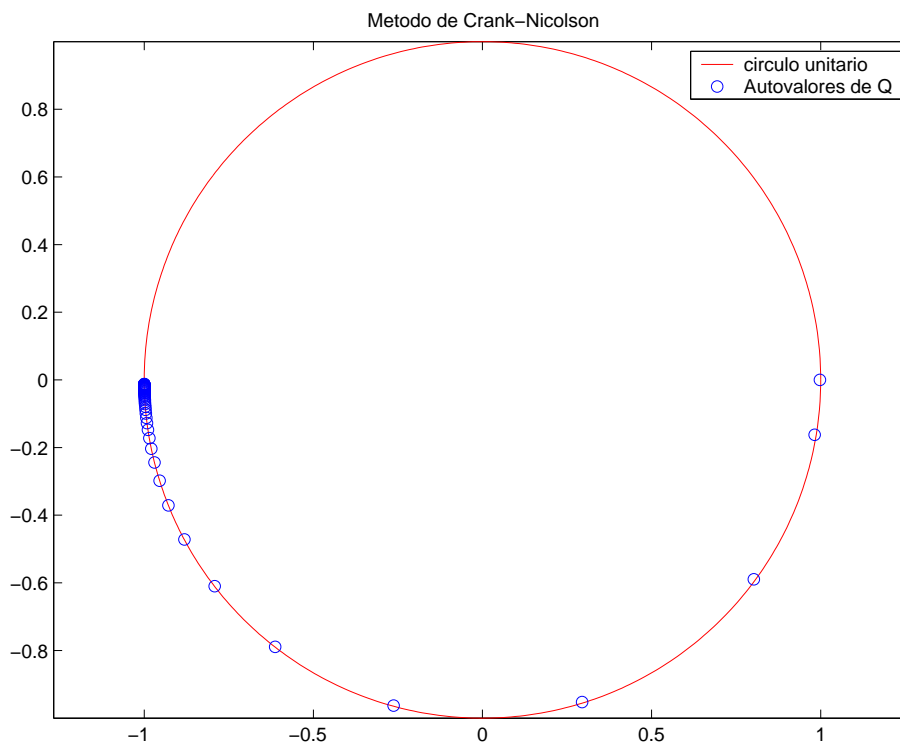
En la figura 2.2 se puede apreciar que los autovalores de  $Q$  se encuentran en la frontera del círculo unitario, este gráfico fue obtenido para los siguientes valores:

$$n = 71, h = \frac{1}{70}, k = \frac{1}{600}, |r| = 40.83$$

Razonando de la misma manera al esquema anterior, la tabla 2.2 nos muestra que los autovalores son menores o iguales que 1 con un error del orden de 2 en  $|\lambda_{max}|$ .

Por lo tanto nos aventuramos a conjeturar que los autovalores de  $Q$  en módulo son menores o iguales a 1, donde  $Q$  es la matriz asociada a este esquema.

Figura 2.2: Autovalores de  $Q$  sobre el círculo unitario



**Observación 2.2** Para efectos de la implementación computacional se optó por reescribir el sistema (2.31) de la forma siguiente:



$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{\alpha h}{k} - 1 & & & \\ -r & (1+2r) & -r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -r & (1+2r) & -r \\ & & & -r & (1+2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{0,q+1} \\ u_{1,q+1} \\ \vdots \\ u_{n-2,q+1} \\ u_{n-1,q+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha h}{k} & 0 & & & \\ r & (1-2r) & r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r & (1-2r) & r \\ & & & r & (1-2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{0,q} \\ u_{1,q} \\ \vdots \\ u_{n-2,q} \\ u_{n-1,q} \end{pmatrix}$$

esto fue para evitar el mal condicionamiento de las matrices originales y que estos influyan en una aproximación errada de la solución numérica.

## 2.2.2. Consistencia

Sea  $u$  la solución exacta de la ecuación diferencial de (2.1) de nuestro problema, entonces haciendo uso del teorema de Taylor en la variable  $t$ , tenemos:

$$u_{p,q+1} = u_{p,q+\frac{1}{2}} + \left( \frac{k}{2} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!} \left( \frac{k}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!} \left( \frac{k}{2} \right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(k^4) \quad (2.33)$$

$$u_{p,q} = u_{p,q+\frac{1}{2}} + \left( -\frac{k}{2} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!} \left( \frac{k}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{3!} \left( \frac{k}{2} \right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(k^4)$$

restando esta ecuación de (2.33) tenemos:

$$u_{p,q+1} - u_{p,q} = \left( k \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k^3}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(k^4)$$

así:

$$\frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} = \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k^2}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(k^4) \quad (2.34)$$

Del teorema de Taylor en dos variables, ver apéndice A, expresamos  $u_{p+1,q+1}$  en una vecindad de  $(x_p, t_{q+\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{aligned}
u_{p+1,q+1} = & \left( u + \left( h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{k}{2} \frac{\partial u}{\partial t} \right) + \left( \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{hk}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{k^2}{8} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) \right. \\
& + \left( \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{h^2 k}{4} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + \frac{hk^2}{8} \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \frac{k^3}{48} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \\
& + \left( \frac{h^4}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{h^3 k}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^3 \partial t} + \frac{h^2 k^2}{16} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} \right. \\
& \left. \left. + \frac{hk^3}{48} \frac{\partial^4 u}{\partial x \partial t^3} + \frac{k^4}{2^4 24} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \right) + \dots \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Análogamente para  $u_{p-1,q+1}$  en una vecindad de  $(x_p, t_{q+\frac{1}{2}})$ :

$$\begin{aligned}
u_{p-1,q+1} = & \left( u + \left( -h \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{k}{2} \frac{\partial u}{\partial t} \right) + \left( \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{hk}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{k^2}{8} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) \right. \\
& + \left( -\frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{h^2 k}{4} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - \frac{hk^2}{8} \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \frac{k^3}{48} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right) \\
& + \left( \frac{h^4}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{h^3 k}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^3 \partial t} + \frac{h^2 k^2}{16} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} \right. \\
& \left. - \frac{hk^3}{48} \frac{\partial^4 u}{\partial x \partial t^3} + \frac{k^4}{2^4 24} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \right) + \dots \Big|_{p,q+\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

De las ecuaciones (2.33), (2.35) y (2.36), obtenemos:

$$\begin{aligned}
u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1} & = \left( h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{h^2 k}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} \right. \\
& \left. + \left( \frac{h^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{h^2 k^2}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} + \frac{k^4}{2^3 24} \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \right) + \dots \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} \\
& = \left( h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{h^2 k}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + \frac{h^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{h^2 k^2}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} \right. \\
& \left. + \frac{h^2 k^3}{48} \frac{\partial^5 u}{\partial x^2 \partial t^3} + \frac{h^4 k}{24} \frac{\partial^5 u}{\partial x^4 \partial t} + \dots \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

luego:

$$\frac{u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}}{h^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{k}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{k^2}{8} \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} + \dots \Big|_{p,q+\frac{1}{2}}$$

entonces:

$$\frac{u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}}{h^2} = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{k}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(h^2) + O(k^2) \quad (2.37)$$

Así, de forma análoga, tenemos:

$$\frac{u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}}{h^2} = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{k}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(h^2) + O(k^2) \quad (2.38)$$

Por lo tanto sustituyendo las ecuaciones (2.34), (2.37) y (2.38) en la ecuación (2.24), se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} &= \frac{i}{2} \left( \frac{u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}}{h^2} + \frac{u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}}{h^2} \right) \\ &= \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{k^2}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + O(k^4) - \frac{i}{2} \left( 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(h^2) + O(k^2) \right) \\ &= \left( \frac{\partial u}{\partial t} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} + O(h^2) + O(k^2) \end{aligned}$$

como  $u$  es solución exacta de  $T[u] = 0$ , tenemos:

$$\left( \frac{\partial u}{\partial t} - i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_{p,q+\frac{1}{2}} = 0$$

para cualquier nodo  $(p, q + \frac{1}{2})$ , luego:

$$\begin{aligned} T_h[u_{p,q}] &= \frac{u_{p,q+1} - u_{p,q}}{k} - \frac{i}{2} \left( \frac{u_{p-1,q+1} - 2u_{p,q+1} + u_{p+1,q+1}}{h^2} + \frac{u_{p-1,q} - 2u_{p,q} + u_{p+1,q}}{h^2} \right) \\ &= O(h^2) + O(k^2) \end{aligned}$$

es decir:

$$T_h[u] = O(h^2) + O(k^2)$$

Lo que quiere decir, que el método de Crank-Nicolson para las ecuaciones en diferencias finitas es consistente, y de orden 2. ■

### 2.2.3. Convergencia

La convergencia para el esquema de Crank-Nicolson viene del teorema de Lax:

Como en la sección 2.2.1 probamos que este método es incondicionalmente estable para cualquier valor de  $|r|$ , y en la sección 2.2.2 probamos la consistencia, se sigue del Teorema de Lax que el método de Crank-Nicolson es convergente para cualquier valor de  $r$ . ■

# Capítulo 3

## Resultados Numéricos

En el capítulo anterior mostramos que las soluciones numéricas obtenidas por los métodos implícito y de Crank-Nicolson convergen para la solución del problema (2.1). Ahora, aplicando estos métodos, podremos constatar gráficamente el resultado de estabilización para la ecuación de Schrödinger obtenido en [3] y [4], presentando algunos ejemplos particulares.

El resultado de estabilización descrito en [3] y [4] nos dice que si  $u = u(x, t)$  es la única solución del problema (2.1), con dato inicial  $u(x, 0) = f(x)$  perteneciente al espacio:

$$\mathbb{V} = \{v \in \mathbb{H}^1([0, 1]) ; v(1) = 0\}$$

entonces existen constantes  $c > 0$  y  $w > 0$  tales que:

$$E(t) = \int_0^1 |u_x(x, t)|^2 dx \leq ce^{-wt}, \text{ para todo } t > 0$$

donde  $E(t)$  es la función energía de la solución del problema (2.1).

Para verificar gráficamente este resultado, consideremos inicialmente el dato inicial:

$$f(x) = 1 - x^2, \quad x \in [0, 1]$$

Los resultados numéricos son obtenidos con valores complejos, pero debido a la imposibilidad de trazar los gráficos con estos datos, tomamos la norma euclidiana de  $u(x, t)$ :

$$|u| = \sqrt{(\text{Real}(u))^2 + (\text{Imag}(u))^2}$$

para presentar nuestra solución en un gráfico en el cual podemos visualizar su comportamiento asintótico.

En la figura (3.1) tenemos el gráfico de la solución numérica obtenida con el método de Crank-Nicolson, para el cuál fueron necesarios 70 iteraciones para alcanzar el valor de  $t = 10$ , con los siguientes valores:

$$n = 21, \quad m = 71, \quad h = 0.1, \quad k = \frac{1}{70}, \quad |r| = 28.57$$

Estos valores implican usar un mallado conformado por 1491 nodos, así para cada valor del tiempo  $t_q$  se tiene que resolver un sistema de ecuaciones de orden 20.

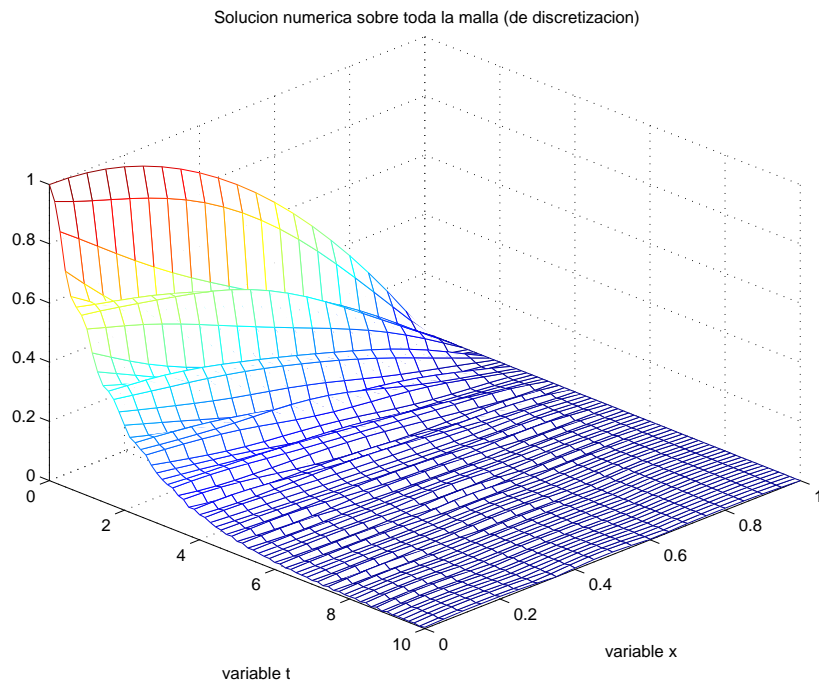


Figura 3.1: Solución aproximada (método de Crank Nicolson)

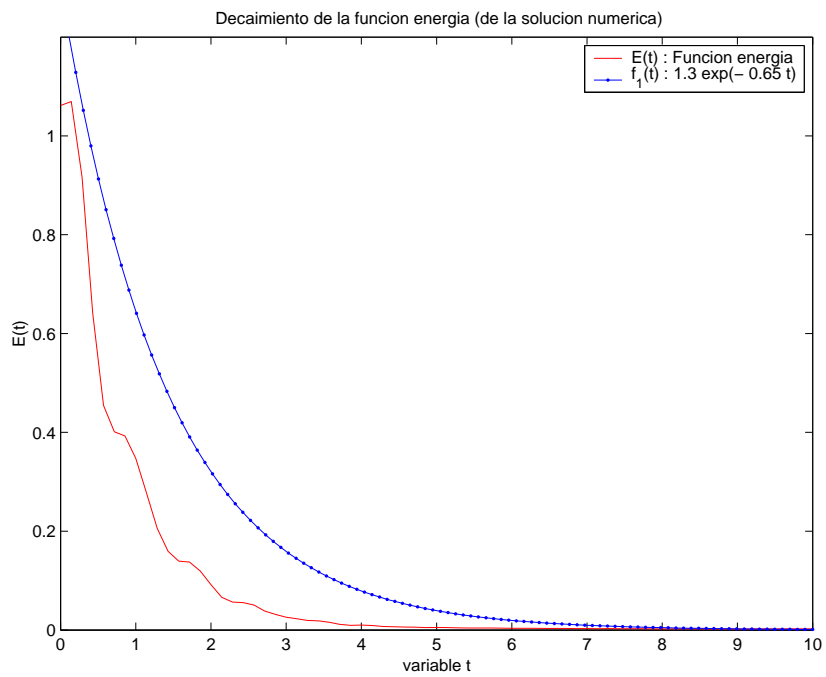


Figura 3.2: Gráfico de la función energía  $E(t)$

En los sucesivos ejemplos a considerar, tomaremos una discretización relativamente pequeña en la variable  $x$ , para no exigir demasiado al ordenador.

En la figura (3.2) tenemos la respectiva función energía  $E(t)$  para  $t \in [0, 10]$ , ella es acotada por la función  $f_1(t) = 1.3 e^{-0.65t}$  (la cuál fue obtenida por inspección). La existencia de una función mayorante para  $E(t)$  está asegurada por los resultados de [3] y [4] .

Ahora, usamos el método implícito para obtener la solución numérica  $u(x, t)$  para el mismo valor de  $|r|$ , vea la figura (3.3); esto es para efectuar comparaciones con respecto a las aproximaciones.

En este caso tendremos que considerar los mismos valores de:

$$n = 21, m = 71, h = 0.05, k = \frac{1}{70}, |r| = 28.57$$

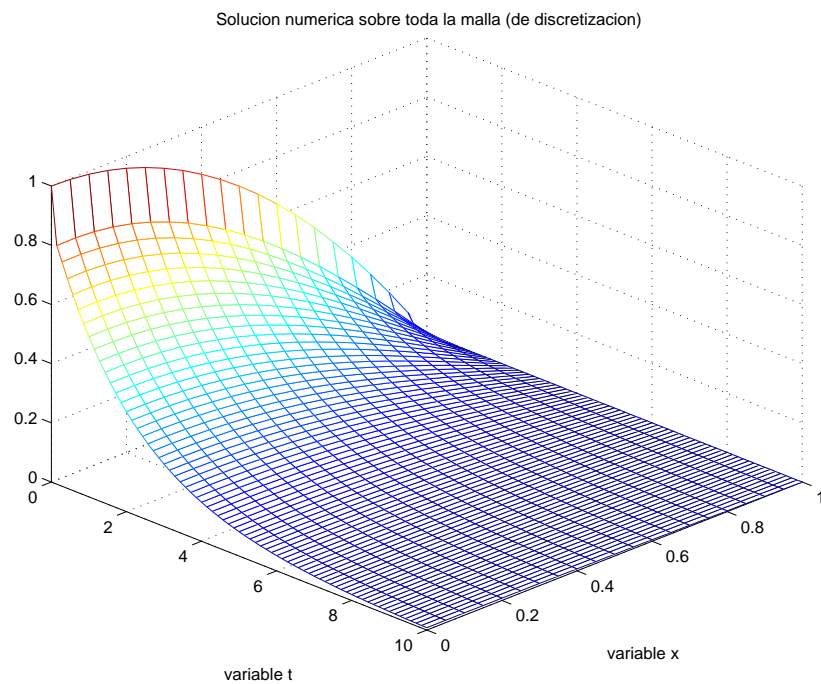


Figura 3.3: Solución aproximada (método implícito)

La correspondiente función que acota a  $E(t)$  para este caso es  $f_2(t) = 1.15 e^{-0.6t}$  con  $t \in [0, 10]$ , ver el gráfico de la figura (3.2).

En la figura (3.5) presentamos los gráficos de la función  $E(t)$  obtenida por el método de Crank-Nicolson y por el método Implícito, además las respectivas funciones que las mayoran (guiarse por los patrones de pintado o comparar el comportamiento en las figuras (3.2) y (3.4)), para cada esquema respectivamente.

Si observamos el gráfico de las funciones  $E(t)$  para ambos métodos, aparentemente por el comportamiento de ellas no podríamos obtener alguna información, a excepción, de que ambas van decayendo a cero cuando la variable temporal  $t$  va creciendo. Pero, si observamos los gráficos de  $f_1(t)$  y  $f_2(t)$ , vemos además del hecho de que ambos estén mayorando la función energía  $E(t)$  de los respectivos esquemas, la función  $f_1(t)$  decae a

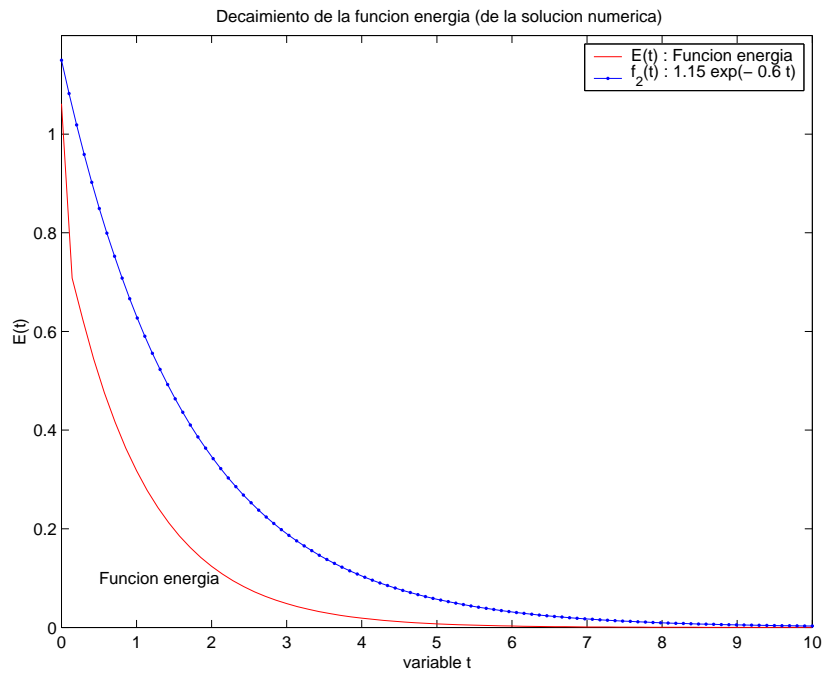


Figura 3.4: Gráfico de la función energía  $E(t)$

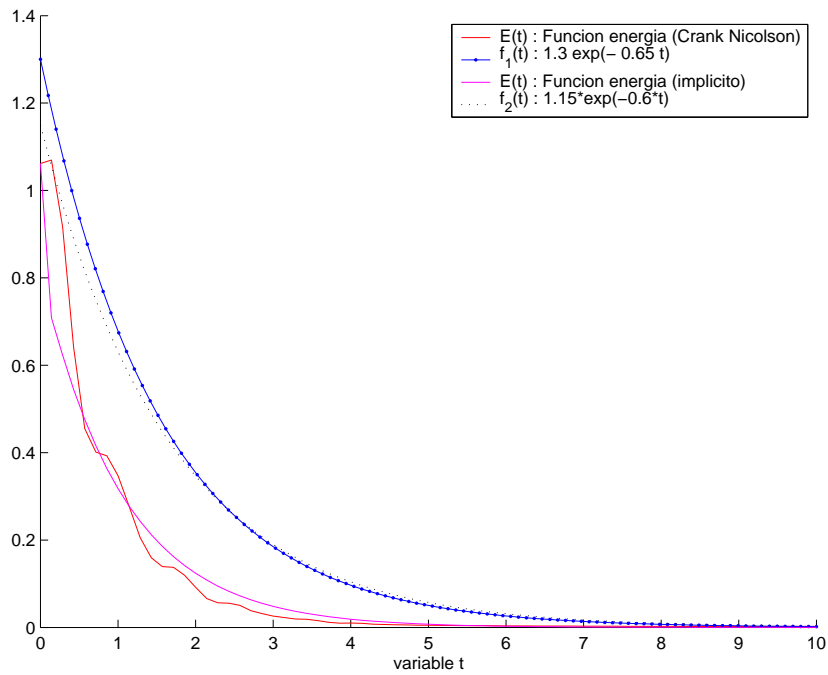


Figura 3.5: Comportamiento asintotico de las funciones energia para cada método

cero mas rápidamente que la función  $f_2(t)$ , esto nos sugiere una idea de como “medir” la eficiencia de la rapidez de los esquemas usados.

Estos resultados vienen a confirmar el orden del error de discretización obtenidas en la sección (2.1.2) donde vimos que el método implícito tiene orden  $O(k)$  y el método de Crank-Nicolson tiene orden  $O(k^2)$  en la sección (2.2.2).

Ahora veamos otro ejemplo, usemos el esquema de Crank-Nicolson para la misma función  $f(x) = 1 - x^2$  como dato inicial, con los siguientes valores:

$$n = 21, m = 101, h = 0.05, k = \frac{1}{100}, |r| = 20$$

Este ligero cambio en el valor de  $m$  nos lleva a reestructurar el mallado, el cual se traduce en 2121 nodos; pero manteniendo el orden de la matriz asociada a ella.

Necesitamos hacer 100 iteraciones para alcanzar el valor de  $t = 10$  y obtener la solución aproximada para nuestro problema, ver el gráfico (3.6).

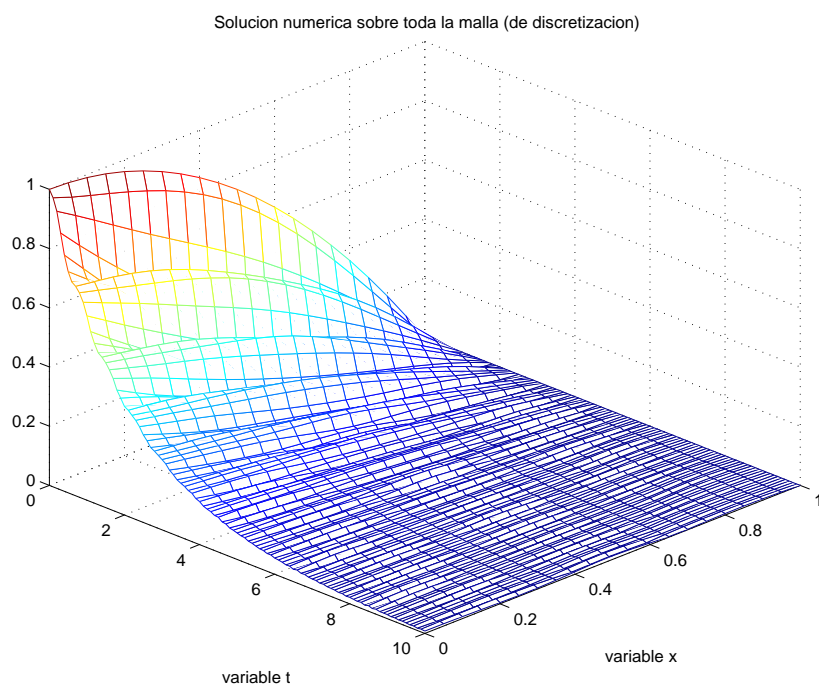


Figura 3.6: Solución aproximada (método de Crank Nicolson)

En la figura (3.7) se observa el gráfico de la respectiva función energía  $E(t)$ , así como de  $f_1(t) = 1.2 e^{-0.5t}$ .

Usemos ahora el esquema implícito para este mismo valor de  $|r|$ , para esto tomamos el respectivo valor de  $k$  para obtener la solución numérica en la figura (3.8).

Si quisiésemos medir o comparar con el mismo valor de  $r$  para ambos métodos, tendríamos que emplear el doble de iteraciones en el método implícito, lo que implicaría un mayor costo computacional.

El gráfico de la función energía  $E(t)$  y de la función que la mayora  $f_2(t) = 1.3 e^{-0.7t}$  pueden observarse en la figura (3.9).



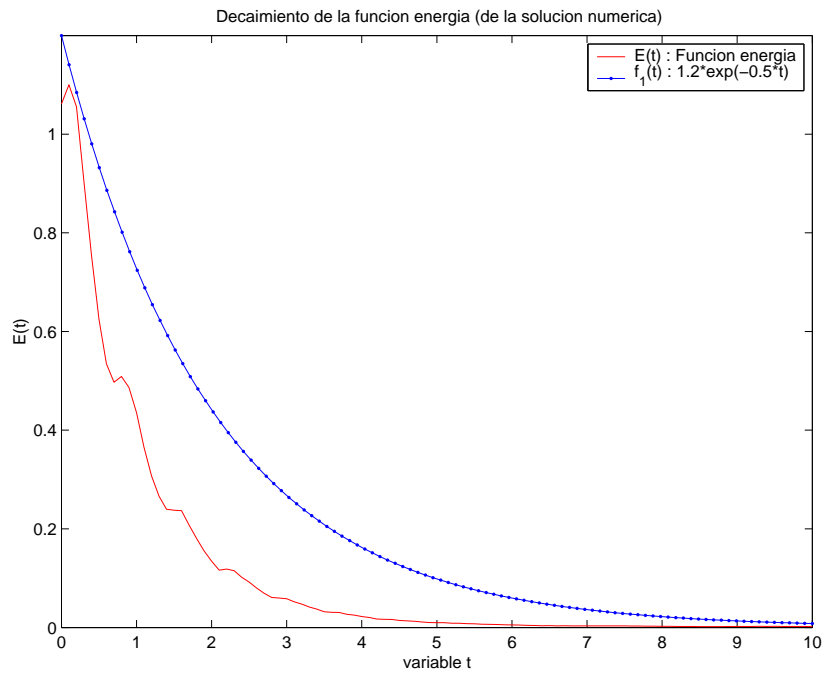


Figura 3.7: Gráfico de la función energía

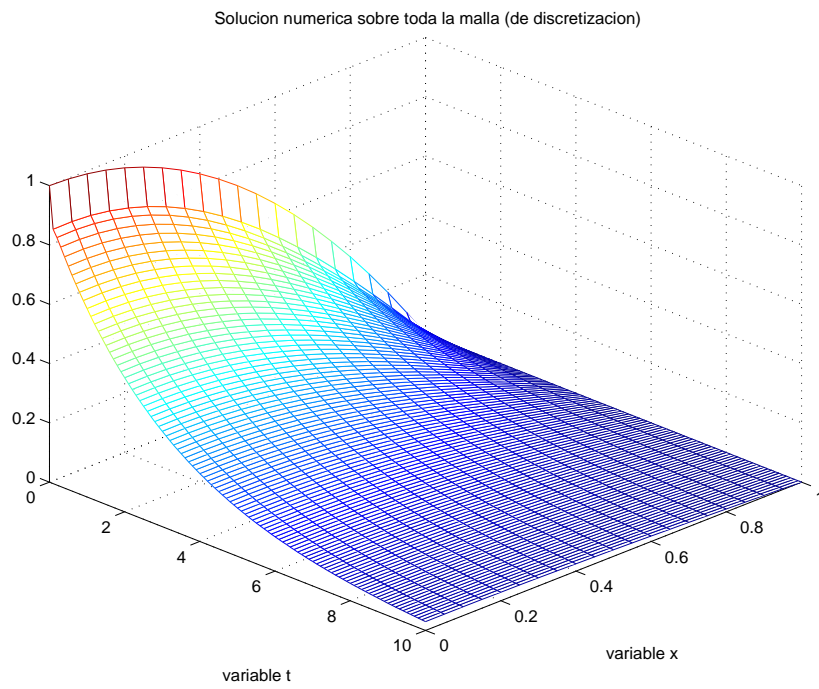


Figura 3.8: Solución aproximada (método implícito)

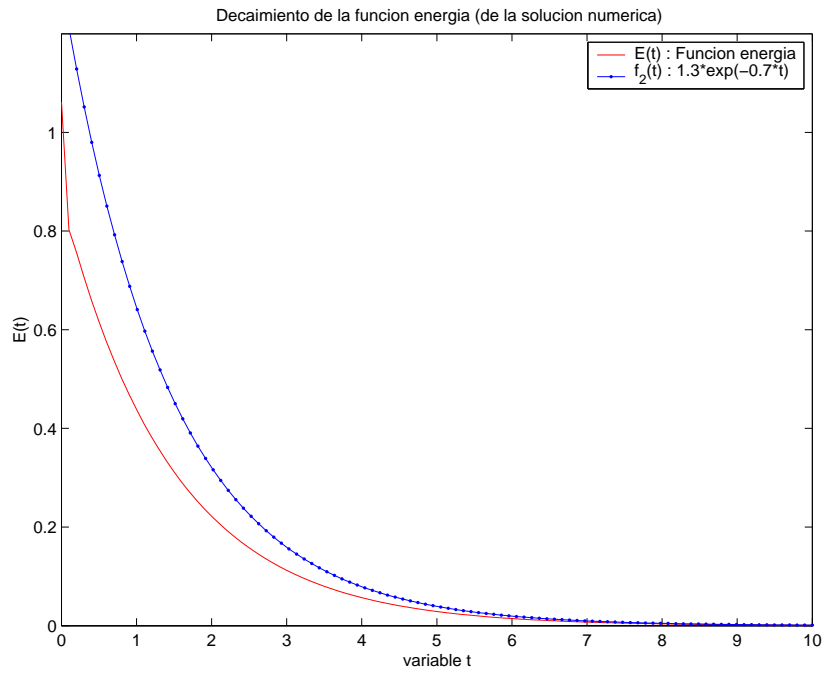


Figura 3.9: Gráfico de la función energía

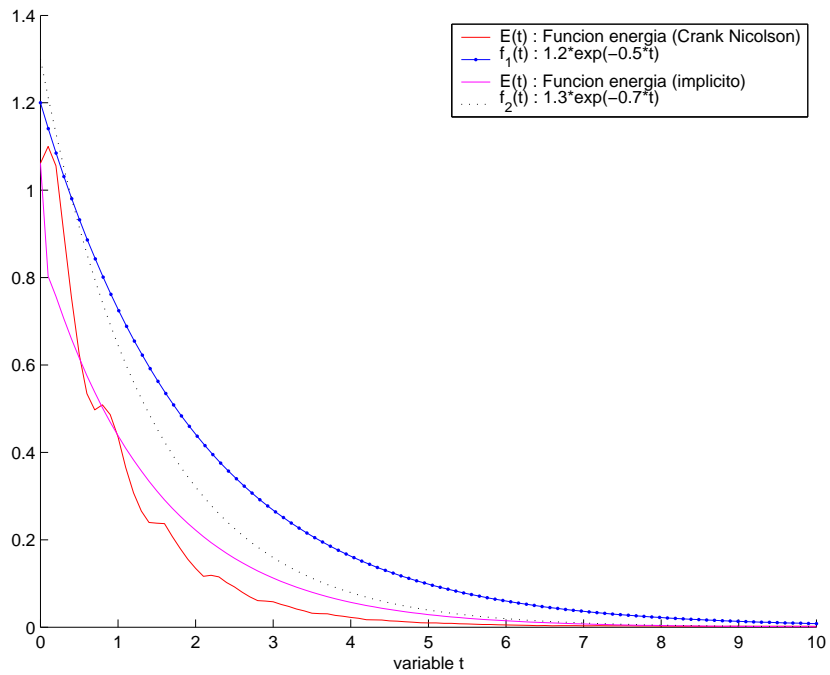


Figura 3.10: Funciones energía para ambos métodos.

En la figura (3.10) podemos ver la comparación gráfica de las funciones  $E(t)$  para ambos esquemas y sus respectivas funciones mayorantes (para  $|r|=20$ ).

Análogamente al razonamiento anterior ( $|r|=28.57$ ), observamos primero que  $E(t)$  está decayendo a cero cuando  $t$  crece (vea la figura (3.5)). Segundo, las funciones mayorantes para  $E(t)$  en los esquemas de Crank-Nicolson e implícito respectivamente, ellas tienden a cero con velocidades diferentes, vea las gráficas de la figura (3.5) y (3.10). Así, esto nos dice que el esquema de Crank-Nicolson es mas rápido que el esquema implícito, esto dentro de la idea que comentamos en el ejemplo anterior.

En la siguiente tabla tenemos los valores que se han obtenido para  $E(t)$  en  $x = 0.5$  cuando  $t$  varía, para varios valores de  $|r|$  con el método de Crank-Nicolson y el método implícito.

A pesar de saber (teóricamente) de que nuestra solución y la función energía tienden a cero cuando  $t$  crece, la tabla (3.1) nos muestra un comportamiento semejante en los valores de  $E(t)$  para los diversos valores de  $|r|$ .

Las segunda y tercera columna corresponden a  $|r|=28.57$  y las dos últimas para  $|r|=20$ .

Tabla 3.1: Descripción numérica para la función energía

$t$	Crank-Nicolson	implícito	Crank-Nicolson	implícito
0.00	1.06158	1.06158	1.14602	1.14602
0.43	0.64105	0.54479	0.60517	0.59168
0.86	0.39276	0.36358	0.34394	0.40213
1.29	0.20564	0.24285	0.16548	0.27347
1.71	0.13754	0.16220	0.10210	0.18597
2.14	0.06619	0.10834	0.04600	0.12647
2.57	0.05054	0.07236	0.03306	0.08600
3.00	0.02591	0.04833	0.01631	0.05849
3.43	0.01866	0.03228	0.01114	0.03977
3.86	0.00965	0.02156	0.00645	0.02705
4.29	0.00733	0.01440	0.00498	0.01839
4.71	0.00586	0.00962	0.00409	0.01251
5.14	0.00494	0.00643	0.00389	0.00851
5.57	0.00402	0.00429	0.00336	0.00578
6.00	0.00357	0.00287	0.00316	0.00393
6.43	0.00323	0.00191	0.00301	0.00268
6.86	0.00302	0.00128	0.00292	0.00182
7.29	0.00285	0.00085	0.00275	0.00124
7.71	0.00256	0.00057	0.00252	0.00084
8.14	0.00237	0.00038	0.00230	0.00057
8.57	0.00224	0.00025	0.00217	0.00039
9.00	0.00224	0.00017	0.00219	0.00026
9.43	0.00230	0.00011	0.00232	0.00018
9.86	0.00245	0.00008	0.00248	0.00012

En el siguiente ejemplo usamos como dato inicial la función:

$$f(x) = 1 - 4 \left( x - \frac{1}{2} \right)^2$$

Esta función se encuentra en  $\mathbb{H}_0^1([0, 1])$ , pues:

$$f(0) = f(1) = 0 \text{ y } f, f' \in L^2([0, 1])$$

De manera semejante a los ejemplos anteriores, tomamos los valores respectivos de:

$$n = 21, m = 101, h = 0.05, k = 0.1, |r| = 20$$

La finalidad de este ejemplo es mostrar que el método de Crank-Nicolson también nos está proporcionando lo esperado con respecto al decaimiento de la solución del problema (2.1) para una función de dato inicial perteneciente a  $\mathbb{H}_0^1([0, 1])$ , vea la figura (3.11), esto es aún, para un valor de  $|r| = 20$

Esto ya era esperado del hecho de que este método en general es estable, a pesar de no haber podido mostrar la estabilidad para valores arbitrarios de  $r$  asociado a nuestro problema.

En la figura (3.12) tenemos la comparación de la función  $E(t)$  con la función que la acota:

$$g(t) = 4.5e^{-0.4t}$$

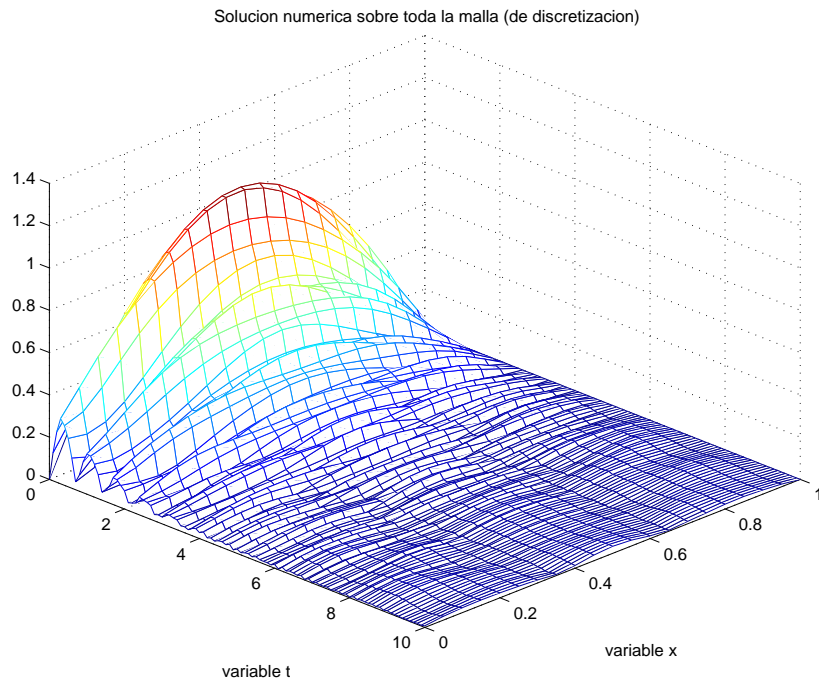


Figura 3.11: Solución aproximada por el método de Crank-Nicolson

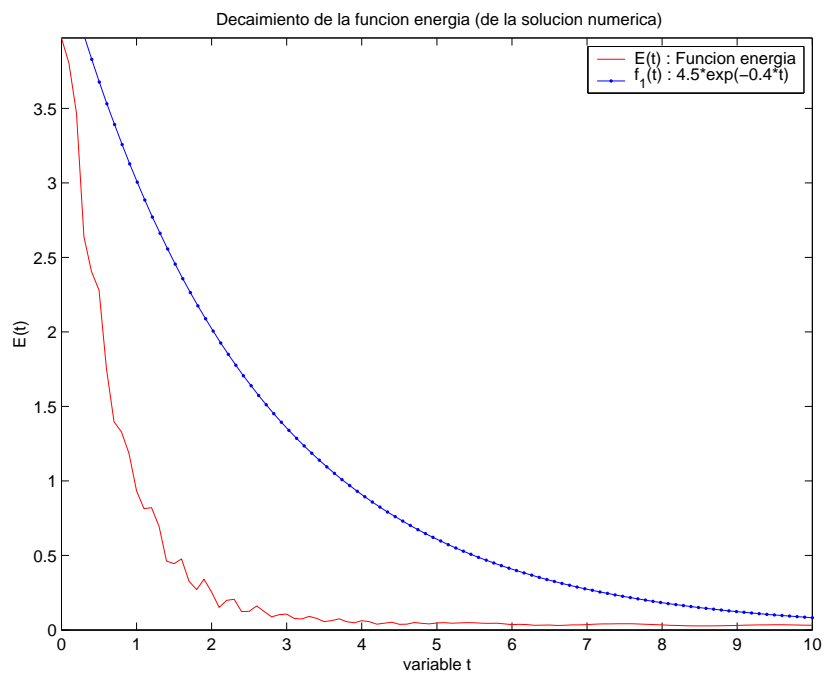


Figura 3.12: Gráfica de la función energía

# Conclusiones

El esquema implícito siempre es incondicionalmente estable para cualquier valor de  $r$  al hacer la discretización del problema:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} & , \quad (x, t) \in \Omega \\ u = 0 & , \quad x \in \partial\Omega \end{cases}$$

La prueba de este hecho puede ser vista en [1], [5], [8] y [9]. En [8] se obtiene una matriz simétrica de elementos reales, y usando los teoremas del Algebra Lineal se consigue la estabilidad. En nuestro caso, nuestra matriz definida en (2.20) tiene coeficientes que son complejos, fueron estos los que hicieron inviable la aplicación de los teoremas del apéndice A para obtener la estabilidad del esquema implícito; esto ocurrió de forma análoga en el método de Crank-Nicolson.

Esto nos llevó a hacer una pesquisa numérica con ayuda del software `Octave` para estudiar los autovalores y tentar encontrar un dominio para ellos; lo que se consiguió puede apreciarse en la tabla (2.1) para el método implícito y en la tabla (2.2) para el método de Crank-Nicolson.

Se obtuvo una agradable sorpresa cuando trazamos los gráficos de los autovalores en el círculo unitario de radio 1, vea la figura (2.1) en el método implícito y la figura (2.2) en el método de Crank-Nicolson; en este último los respectivos autovalores se encuentran en la frontera del círculo unitario. No encontramos ningún resultado parecido como este en la bibliografía consultada, pero nos dio la confianza necesaria para garantizar el principal argumento para tener la estabilidad satisfecha en ambos métodos considerados.

Buscamos utilizar otras aproximaciones para  $u_{xx}$  y  $u_t$  en las condiciones de frontera del problema (2.1), las cuáles solo hicieron que la expresión final para la ecuación en diferencias en su forma matricial se tornase mas difícil de ser manipulada y estudiada con respecto a la estabilidad de los esquemas, motivo por la cual tomamos como versión final las aproximaciones presentadas en este trabajo. En muchos libros, por ejemplo ver en [8] y [9], podemos verificar que el esquema de Crank-Nicolson converge mas rápido que los otros esquemas.

El método implícito implica que se debe emplear el doble de pasos en relación a los usados en el método de Crank-Nicolson para alcanzar un valor de  $t$ , para compartir el mismo valor de  $r$ ; es decir, gastamos como mínimo el doble de tiempo, lo que ya representa una desventaja, si lo que se desea es la rapidez. Así el método de Crank-Nicolson es técnicamente hablando, el mas apropiado para obtener una solución aproximada de nuestro problema.

Si bien es cierto se garantiza la estabilidad para autovalores en módulo menores o igual a 1, en la practica se debe trabajar con la desigualdad estricta.

El diseño del trabajo y de la implementación computacional permite adaptar la resolución numérica para otra EDP, dado que se realizó empleando componentes o módulos separados e independientes.

Finalmente se han empleado rutinas de aproximación de autovalores, el método de **Crout** para sistemas tridiagonales, cuadratura mecánica y derivación numérica para el calculo de la función energía. Esto fue posible empleando las rutinas por medio de un lenguaje compilado como es **octave**.

# Apéndice A

## Algunos teoremas

**Teorema A.1 (de Gerschgorin)** *El módulo del mayor autovalor de  $A$  (matriz cuadrada) no puede exceder a la mayor suma de los módulos de los términos de cualquier fila o cualquier columna, es decir:*

$$\begin{aligned} \max_{1 \leq s \leq n} |\lambda_s| &\leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right\} \\ \max_{1 \leq s \leq n} |\lambda_s| &\leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right\} \end{aligned}$$

**Demostración:**

Sea  $\lambda_s$  un autovalor de  $A$  e  $x_s = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  el autovector asociado,  $x_s \neq 0$ .

Entonces, tenemos:

$$Ax_s = \lambda x_s$$

es decir:

$$\begin{aligned} a_{11}v_1 + a_{12}v_2 + \dots + a_{1n}v_n &= \lambda_s v_1 \\ &\vdots \\ a_{m1}v_1 + a_{m2}v_2 + \dots + a_{mn}v_n &= \lambda_s v_m \\ &\vdots \\ a_{n1}v_1 + a_{n2}v_2 + \dots + a_{nn}v_n &= \lambda_s v_n \end{aligned}$$

Sea:

$$\begin{aligned} |v_m| &= \max_{1 \leq j \leq n} \{|v_j|\} \\ \text{então: } |v_q| &\leq |v_m| \quad \forall j = 1, 2, \dots, n \\ \text{logo: } \left| \frac{v_q}{v_m} \right| &\leq 1 \quad \forall j = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$



Entonces:

$$\lambda_s v_m = a_{m1}v_1 + a_{m2}v_2 + \dots + a_{mn}v_n = \lambda_s v_m$$

$$\lambda_s v_m = \sum_{j=1}^n a_{mj} v_j$$

$$\lambda_s = \sum_{j=1}^n a_{mj} \left( \frac{v_j}{v_m} \right)$$

Luego:

$$|\lambda_s| \leq \sum_{j=1}^n |a_{mj}| \left| \frac{v_j}{v_m} \right| \leq \sum_{j=1}^n |a_{mj}| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right\}$$

es decir:

$$|\lambda_s| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right\}$$

Esto vale para cualquier  $\lambda_s$ ; entonces tomamos el mayor de ellos, así:

$$\max_{1 \leq s \leq n} |\lambda_s| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right\}$$

Tenemos que, los autovalores de  $A^t$  son los mismos para  $A$ , entonces de (i), se tiene:

$$\max_{1 \leq s \leq n} |\lambda_s| \leq \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ji}| \right\}, \text{ pues } A^t = (a_{ji})$$

cambiando la notación se tiene:

$$\max_{1 \leq s \leq n} |\lambda_s| \leq \max_{1 \leq j \leq n} \left\{ \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right\} \quad \blacksquare$$

**Teorema A.2 (de Brauer)** Sea  $P_s = \sum_{j=1}^n |a_{sj}|$ , tal que  $j \neq s$ . Entonces cada autovalor de  $A$  está en el interior o en la frontera de al menos uno de los discos:

$$D_s = \{ \lambda; |\lambda - a_{ss}| \leq P_s \}$$

**Demostración:**

Tenemos:

$$Ax = \lambda x$$

donde  $x = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  autovector y  $\lambda$  autovalor tomando:

$$|v_m| \geq |v_q| \quad \forall j = 1, 2, \dots, n; \quad m \in [1, n]$$

donde  $v_m$  es la mayor componente de  $x$ .

Del teorema anterior:

$$\begin{aligned} \lambda &= \sum_{i=1}^n a_{ij} \left( \frac{v_q}{v_m} \right) = a_{mm} + \sum_{i=1}^n a_{ij} \left( \frac{v_q}{v_m} \right); \quad j \neq m \\ \Rightarrow |\lambda - a_{mm}| &\leq \sum_{j=1}^n |a_{mj}| \left| \frac{v_q}{v_m} \right| \leq \sum_{j=1}^n |a_{mj}| = P_m \end{aligned}$$

Entonces:

$$|\lambda - a_{mm}| \leq P_m \Rightarrow \lambda \in D_m$$

Como  $\lambda$  es un autovalor arbitrario, entonces  $\lambda$  está en cualquier  $D_s$ . ■

**Teorema A.3 (de Taylor)** Sean  $f(x, y)$  y todas sus derivadas parciales de orden menor o igual a  $n + 1$  son continuas; sea  $D = \{(x, y) \text{ tal que } a \leq x \leq b; c \leq y \leq d\}$ . Sea  $(x_0, y_0) \in D$ , para todo  $(x, y) \in D$ , entonces existen  $\xi \in (x, x_0)$  e  $\eta \in (y, y_0)$  con:

$$f(x, y) = p_n(x, y) + r_n(x, y)$$

donde:

$$\begin{aligned} p_n(x, y) &= f(x_0, y_0) + \left( (x - x_0) \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) + (y - y_0) \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \right) \\ &+ \left( \frac{(x - x_0)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) + (x - x_0)(y - y_0) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0) + \frac{(y - y_0)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) \right) \\ &+ \dots + \\ &+ \left( \frac{1}{n!} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} (x - x_0)^{n-j} (y - y_0)^j \frac{\partial^n f}{\partial x^{n-j} \partial y^j}(x_0, y_0) \right) \\ r_n(x, y) &= \frac{1}{(n+1)!} \sum_{j=0}^{n+1} \binom{n+1}{j} (x - x_0)^{n+1-j} (y - y_0)^j \frac{\partial^{n+1} f}{\partial x^{n+1-j} \partial y^j}(\xi, \eta) \end{aligned}$$

$p_n$  es llamado de polinomio de Taylor de grado  $n$  en dos variables para la función  $f$  alrededor de  $(x_0, y_0)$  y  $r_n(x, y)$ , es el termino de residuo asociado con  $p_n(x, y)$ .

**Demostración:**

Ver [2].

# Apéndice B

## Algoritmos

### 1. Método Implícito:

1. Efectuar la elección del número de nodos en el dominio de las variables  $x$  e  $y$ , además de la función dato inicial:

$$n, m, f$$

2. Calcular:

$$h = \frac{1}{n-1}, k = \frac{t_f}{m-1}, r = i \frac{k}{h^2}$$

3. Construir la matriz

$$A = [a_{l,z}]_{n \times n}$$

definida en (2.20)

$$\begin{aligned} a_{1,1} &= a \\ a_{1,2} &= 1 - a \\ a_{l,l} &= 1 + 2r, \quad l = 2, 3, \dots, n \\ a_{l,l+1} &= -r, \quad l = 2, 2, \dots, n-1 \\ a_{l,l-1} &= -r, \quad l = 2, 3, \dots, n-1 \\ a_{l,z} &= 0, \quad \text{en los demas casos} \end{aligned}$$

4. Implementar el método iterativo (2.20); es decir, para cada  $q = 0, 1, \dots, m$  resolver:

$$Au_{q+1} = u_q$$

por el método de Crout o el de eliminación gaussiana.

5. Diseñar la malla compuesta por los valores  $| u_{p,q} |$ ; es decir:

$$M = [| u_{p,q} |]$$

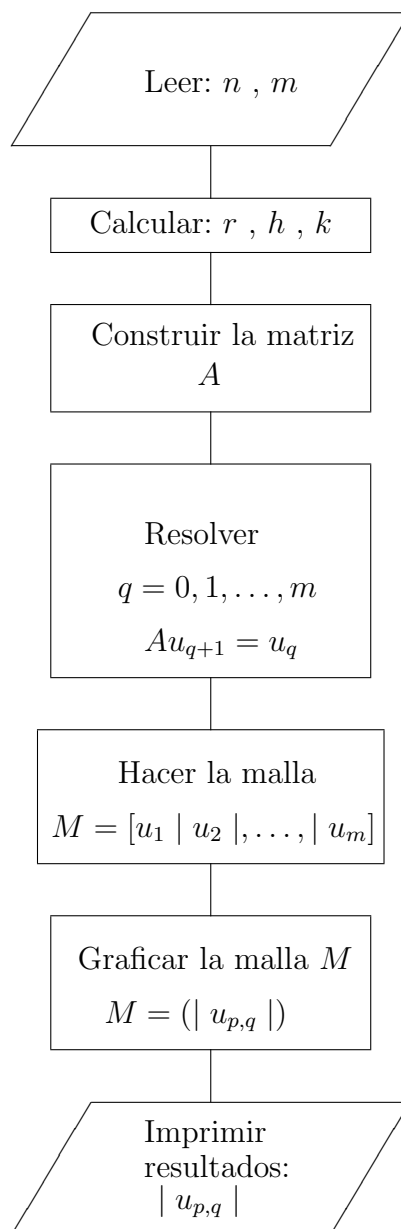
que es una matriz de orden  $n \times m$

6. Graficar  $M$

7. Imprimir:

$$u_{p,q} \text{ o } |u_{p,q}|$$

Diagrama de flujo:



## 2. Método de Crank-Nicolson:

1. Hacer la elección del número de nodos en la variable  $x$  e  $y$ :

$$n, m$$

2. Calcular:

$$h = \frac{1}{n-1}, k = \frac{tf}{m-1}, r = i \frac{k}{2h^2}$$

3. Diseñar las matrices:

$$A = [a_{l,z}]_{n \times n} \text{ y } B = [b_{l,z}]_{n \times n}$$

definida en (2.31)

$$\begin{aligned} a_{1,1} &= 1 - \frac{k}{\alpha h} \\ a_{1,2} &= \frac{k}{\alpha h} \\ a_{l,l} &= 1 + 2r, \quad l = 2, 3, \dots, n \\ a_{l,l+1} &= -r, \quad l = 2, 2, \dots, n-1 \\ a_{l,l-1} &= -r, \quad l = 2, 3, \dots, n-1 \\ a_{l,z} &= 0, \text{ en los otros casos} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{1,1} &= 1 \\ b_{1,2} &= 0 \\ b_{l,l} &= 1 - 2r, \quad l = 2, 3, \dots, n \\ b_{l,l+1} &= r, \quad l = 2, 2, \dots, n-1 \\ b_{l,l-1} &= r, \quad l = 2, 3, \dots, n-1 \\ b_{l,z} &= 0, \text{ en los otros casos} \end{aligned}$$

4. Implementar el esquema iterativo (2.31); es decir, para cada  $q = 0, 1, \dots, m$  resolver:

$$Au_{q+1} = Bu_q$$

5. Diseñar la malla compuesta por los valores  $|u_{p,q}|$ ; es decir:

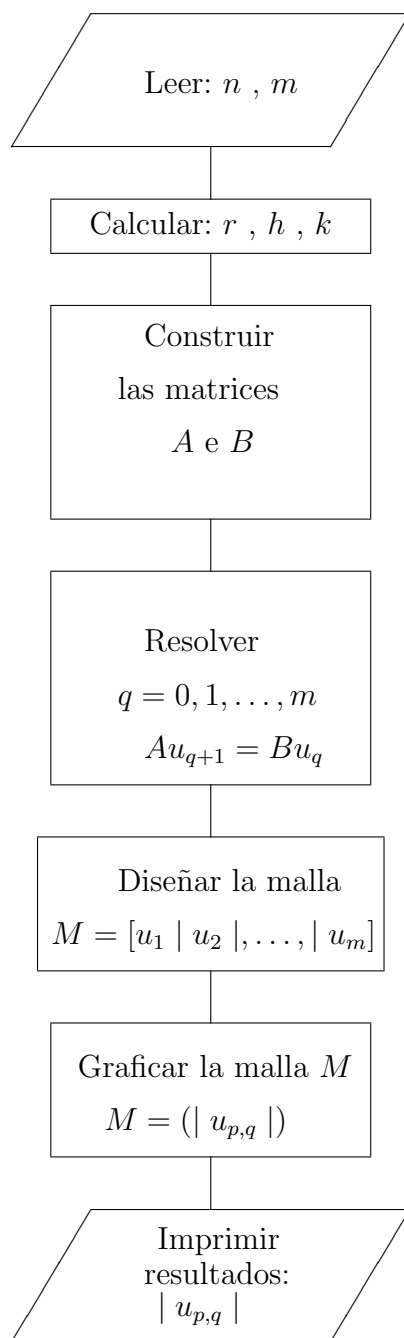
$$M = [|u_{p,q}|]_{n \times m}$$

6. Graficar  $M$ .

7. Imprimir:

$$u_{p,q} \circ |u_{p,q}|$$

Diagrama de flujo:



# Bibliografía

- [1] Ames. William F. **Numerical Methods for Partial Differential Equations.** Academic Press U.S.A. 1977
- [2] Burden Richard I. and Faires J. Douglas **Análisis Numérico.** Grupo Editorial Iberoamerica. Mexico 1985
- [3] Machtyngier. E. **Controlabilidade Exata e Estabilização da Equação de Schrödinger.** Tese de Doutorado U.F.R.J. 1991
- [4] Machtyngier E. and Zuazua E. **Stabilization of the Schrödinger Equation.** Portugaliae Mathematica, vol 51 fasc 2 (1994) 243-256.
- [5] Mei Chiang C. **The Applied Dynamics of Ocean Surface Waves.** World Scientific Publishing. 1989
- [6] Mitchell A.R. and Griffiths D.F. **The Finite difference method in Partial Differential Equations.** John Wiley and Sons U.S.A. 1980
- [7] Raupp Marco A. **Análise Numérica e Equações Diferenciais.** Laboratorio de Cálculo-CBPF Brasil. 1978
- [8] Richtmyer. Robert D. and Morton. K. W. **Difference Methods for Initial Value Problems.** John Willey and Sons U.S.A. 1976
- [9] Smith G. D. **Numerical Solution of Partial Differential Equations.** Oxford University Press London 1969
- [10] Sod.Gary A. **Numerical methods in Fluid Dynamics Initial and Initial Boundary Value Problems.** Cambrigde University Press U.S.A. 1985