

Métodos de Descomposición Temporal  
XVII Congreso Dr. Antonio Monteiro  
Depto. de Matemática, UNS  
Inst. de Matemática, CONICET, UNS

Tico

Junio de 2023

# Problemas parciales

Ecuación de evolución

$$\begin{cases} u_t = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

# Problemas parciales

Ecuación de evolución

$$\begin{cases} u_t = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Flujo de la ecuación:  $\Phi(t, u_0) = u(t)$

# Problemas parciales

Ecuación de evolución

$$\begin{cases} u_t = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Flujo de la ecuación:  $\Phi(t, u_0) = u(t)$

Problemas parciales:  $u_t = A(u), \quad u_t = B(u)$



# Problemas parciales

Ecuación de evolución

$$\begin{cases} u_t = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Flujo de la ecuación:  $\Phi(t, u_0) = u(t)$

Problemas parciales:  $u_t = A(u), \quad u_t = B(u)$

Flujos parciales:  $\Phi_A(t, u_0) = u(t), \quad \Phi_B(t, u_0) = u(t)$

# Problemas parciales

- En muchos casos,  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$  son fáciles de calcular numéricamente (o analíticamente)

# Problemas parciales

- En muchos casos,  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$  son fáciles de calcular numéricamente (o analíticamente)
- **Pregunta:** ¿Cómo escribir  $\Phi(t, \cdot)$  en términos de  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$ ?

# Problemas parciales

- En muchos casos,  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$  son fáciles de calcular numéricamente (o analíticamente)
- **Pregunta:** ¿Cómo escribir  $\Phi(t, \cdot)$  en términos de  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$ ?
- **Respuesta:** Alternar la aplicación de los flujos parciales

# Problemas parciales

- En muchos casos,  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$  son fáciles de calcular numéricamente (o analíticamente)
- **Pregunta:** ¿Cómo escribir  $\Phi(t, \cdot)$  en términos de  $\Phi_A(t, \cdot)$  y  $\Phi_B(t, \cdot)$ ?
- **Respuesta:** Alternar la aplicación de los flujos parciales

$$\Phi(t) \cong \Phi_B(t_s^B) \circ \Phi_A(t_s^A) \circ \cdots \circ \Phi_B(t_1^B) \circ \Phi_A(t_1^A)$$

# Ejemplo: problema lineal

$$\begin{cases} \dot{x} = x + 2y \\ \dot{y} = -2x - 2y \end{cases}$$

El flujo  $\Phi$  está dado por

$$\Phi(t) = e^{-\frac{1}{2}t} \left( \cos(\theta t) I + \theta^{-1} \sin(\theta t) C \right)$$

donde  $I$  es la matriz identidad,  $\theta = \frac{\sqrt{7}}{2}$  y la matriz  $C$  está dada por

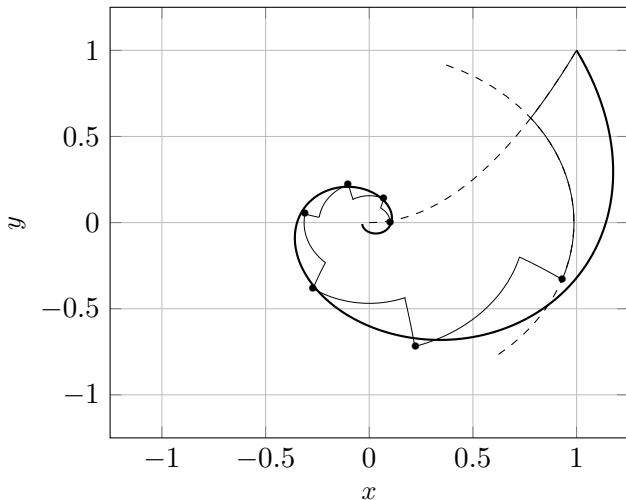
$$C = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 2 \\ -2 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

## Ejemplo: problema lineal

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & -2 \end{pmatrix} = A + B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Phi_A(t) = \begin{pmatrix} e^t & 0 \\ 0 & e^{-2t} \end{pmatrix}, \quad \Phi_B(t) = \begin{pmatrix} \cos(2t) & \sin(2t) \\ -\sin(2t) & \cos(2t) \end{pmatrix}$$

## Ejemplo: problema lineal





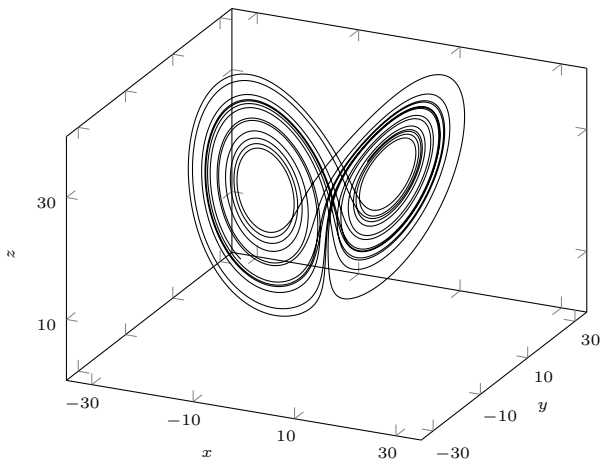
# Ejemplo: atractor de Lorenz

Sistema dinámico determinista tridimensional no lineal:

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma (y - x) \\ \dot{y} = \rho x - y - x z \\ \dot{z} = -\beta z + x y \end{cases}$$

Para  $\sigma = 10, \beta = 8/3, \rho = 28$  tiene un atractor caótico con dimensión de Hausdorff  $2.06 \pm 0.01$

# Ejemplo: atractor de Lorenz



# Ejemplo: atractor de Lorenz

Problema parcial A

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x) \\ \dot{y} = \rho x - y \\ \dot{z} = -\beta z \end{cases}$$

Sistema lineal de dimensión 3 (2 + 1)

$$\Phi_A(t) = \begin{pmatrix} \phi_{1,1}(t) & \phi_{1,2}(t) & 0 \\ \phi_{2,1}(t) & \phi_{2,2}(t) & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta t} \end{pmatrix}$$

El flujo  $\phi$  está dado por

$$\phi(t) = e^{-\frac{1}{2}(\sigma+1)t} \left( \cosh(\omega t) I + \frac{\sinh(\omega t)}{\omega} C \right)$$

donde  $I$  es la matriz identidad,  $\omega = \sqrt{\rho\sigma + \theta^2}$ ,  $\theta = \frac{1}{2}(\sigma - 1)$  y la matriz  $C$  está dada por

$$C = \begin{pmatrix} -\theta & \sigma \\ \rho & \theta \end{pmatrix}$$

# Ejemplo: atractor de Lorenz

Problema parcial B

$$\begin{cases} \dot{x} = 0 \\ \dot{y} = -x z \\ \dot{z} = x y \end{cases}$$

Rotación en el plano  $yz$  con velocidad angular  $x$

$$\Phi_B(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(xt) & -\sin(xt) \\ 0 & \sin(xt) & \cos(xt) \end{pmatrix}$$

# Fórmula de Lie

Para  $A, B \in \mathbb{C}^{d \times d}$

$$\Phi(t) = e^{t(A+B)}, \Phi_A(t) = e^{tA}, \Phi_B(t) = e^{tB}$$

# Fórmula de Lie

Para  $A, B \in \mathbb{C}^{d \times d}$

$$\Phi(t) = e^{t(A+B)}, \Phi_A(t) = e^{tA}, \Phi_B(t) = e^{tB}$$

(S. Lie, 1875)

$$e^{t(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{\frac{t}{n}B} e^{\frac{t}{n}A} \right)^n$$

# Convergencia del método de Lie

A, B localmente Lipschitz

$$\begin{cases} \dot{u} = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$



# Convergencia del método de Lie

A, B localmente Lipschitz

$$\begin{cases} \dot{u} = A(u) + B(u) \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Para todo  $T > 0$ ,  $n \in \mathbb{N}$

$$\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h)$$

donde  $h = T/n$ ,  $u_k = \Phi_B(h, \Phi_A(h, u_{k-1}))$

# Exponencial de matrices

## Producto de exponenciales

$$e^{hA} = I + hA + \frac{h^2}{2} A^2 + O(h^3)$$

$$e^{hB} = I + hB + \frac{h^2}{2} B^2 + O(h^3)$$

$$e^{hB} e^{hA} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2} (A^2 + 2BA + B^2) + O(h^3)$$

## Exponencial de la suma

$$e^{h(A+B)} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2} (A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

## Diferencia

$$e^{h(A+B)} - e^{hB} e^{hA} = \frac{h^2}{2} [B, A] + O(h^3) = O(h^2)$$

# Exponencial de matrices

## Producto de exponenciales

$$e^{hA} = I + hA + \frac{h^2}{2} A^2 + O(h^3)$$

$$e^{hB} = I + hB + \frac{h^2}{2} B^2 + O(h^3)$$

$$e^{hB} e^{hA} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2} (A^2 + 2BA + B^2) + O(h^3)$$

## Exponencial de la suma

$$e^{h(A+B)} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2} (A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

## Diferencia

$$e^{h(A+B)} - e^{hB} e^{hA} = \frac{h^2}{2} [B, A] + O(h^3) = O(h^2)$$

# Método de Strang

Flujos parciales:  $\Phi_A(t)$ ,  $\Phi_B(t)$

# Método de Strang

Flujos parciales:  $\Phi_A(t)$ ,  $\Phi_B(t)$

$$u_0 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} u_1 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} \cdots u_k$$

# Método de Strang

Flujos parciales:  $\Phi_A(t)$ ,  $\Phi_B(t)$

$$u_0 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} u_1 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} \cdots u_k$$

Método de orden 2:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^2)$

# Método de Strang

Flujos parciales:  $\Phi_A(t)$ ,  $\Phi_B(t)$

$$u_0 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} u_1 \xrightarrow{\Phi_A(h/2)\Phi_B(h)\Phi_A(h/2)} \cdots u_k$$

Método de orden 2:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^2)$

$$u_k = \Phi_A(h/2) \Phi_B(h) \Phi_A(h) \cdots \Phi_B(h) \Phi_A(h/2) u_0$$

# Método de Strang

Exponencial de la suma

$$e^{h(A+B)} = I + h(A+B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

Método de Strang

$$e^{\frac{1}{2}hA}e^{hB}e^{\frac{1}{2}hA} = I + h(A+B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

$$e^{h(A+B)} - e^{\frac{1}{2}hA}e^{hB}e^{\frac{1}{2}hA} = O(h^3)$$



# Método de Ruth

Sistema hamiltoniano:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + V(t, \mathbf{r})$$

R. D. Ruth, *A Canonical Integration Technique*,  
IEEE Transactions on Nuclear Science, **30** (4), 1983.

[https://www.researchgate.net/publication/280801614\\_Canonical\\_integration\\_technique](https://www.researchgate.net/publication/280801614_Canonical_integration_technique)

J. E. Marsden and M. West, *Discrete mechanics and variational integrators*, Acta Numerica (2001), 357–514.

# Método de Ruth

Sistema hamiltoniano

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{r}} V(t, \mathbf{r}) \\ \mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0, \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0 \end{cases}$$

# Método de Ruth

Problema parcial A

$$(A) \begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = 0, \\ \mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0, \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0 \end{cases}$$

Integrador  $\Phi_A$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) &= \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_0(t - t_0) \\ \mathbf{p}(t) &= \mathbf{p}_0 \end{aligned}$$

# Método de Ruth

Problema parcial B

$$(B) \begin{cases} \dot{\mathbf{r}} = 0 \\ \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{r}} V(t, \mathbf{r}) \\ \mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0, \mathbf{p}(t_0) = \mathbf{p}_0 \end{cases}$$

Integrador  $\Phi_B$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_0 - \int_{t_0}^t \nabla_{\mathbf{r}} V(t', \mathbf{r}_0) dt'$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\pi}_2) = \Phi_B(b_1 h, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1)$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\pi}_2) = \Phi_B(b_1 h, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1)$$

↙

$$(\boldsymbol{\xi}_3, \boldsymbol{\pi}_3) = \Phi_A(a_2 h, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\pi}_2)$$



# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)$$

$$(\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4)$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)$$

$$(\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4) \rightarrow (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = \Phi_B(b_3 h, \xi_5, \pi_5)$$

# Método de Ruth

Iteración:  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \mapsto (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)$$

$$(\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4) \rightarrow (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = \Phi_B(b_3 h, \xi_5, \pi_5)$$

Si  $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3$  verifica

$$a_1 + a_2 + a_3 = 1, \quad b_1 + b_2 + b_3 = 1$$

$$a_2 b_1 + a_3(b_1 + b_2) = 1/2, \quad a_2 b_1^2 + a_3(b_1 + b_2)^2 = 1/3$$

$$b_3 + b_2(a_1 + a_2)^2 + b_1 a_1^2 = 1/3$$

# Método de Ruth

El método de orden 3:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^3)$

# Método de Ruth

El método de orden 3:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^3)$

El sistema tiene cinco ecuaciones y seis variables

# Método de Ruth

El método de orden 3:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^3)$

El sistema tiene cinco ecuaciones y seis variables

Si  $b_3 = 1$ :

$$a_1 = 7/24,$$

$$a_2 = 3/4,$$

$$a_3 = -1/24$$

$$b_1 = 2/3,$$

$$b_2 = -2/3,$$

$$b_3 = 1$$

# Método de Ruth

El método de orden 3:  $\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\| = O(h^3)$

El sistema tiene cinco ecuaciones y seis variables

Si  $b_3 = 1$ :

$$a_1 = 7/24,$$

$$a_2 = 3/4,$$

$$a_3 = -1/24$$

$$b_1 = 2/3,$$

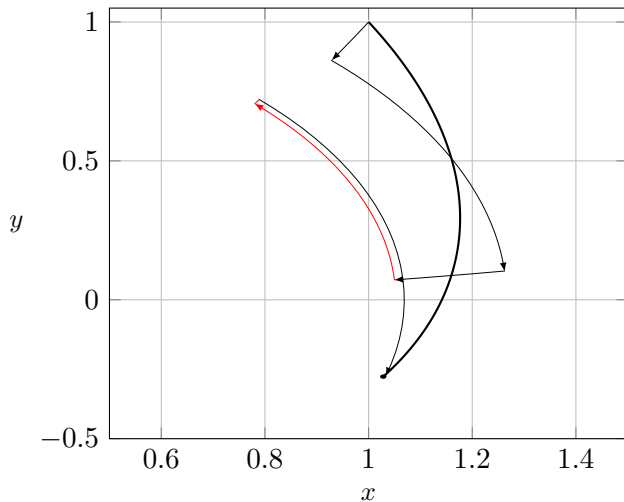
$$b_2 = -2/3,$$

$$b_3 = 1$$

pasos negativos!



# Método de Ruth



# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, Univeristy of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, University of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$$

# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, University of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) \rightarrow (\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\pi}_2) = \Phi_B(b_1 h, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\pi}_1)$$

# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, Univeristy of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, r_0, p_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2)$$



# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, University of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$\begin{array}{l}
 (\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, r_0, p_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1) \\
 \swarrow \\
 (\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)
 \end{array}$$

# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, Univeristy of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$(\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, r_0, p_0) \rightarrow (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1)$$

$$(\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) \rightarrow (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3)$$

$$(\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4)$$

# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, Univeristy of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$\begin{array}{lcl}
 (\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, r_0, p_0) & \rightarrow & (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1) \\
 & \swarrow & \\
 (\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) & \rightarrow & (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3) \\
 & \swarrow & \\
 (\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4) & \rightarrow & (\xi_6, \pi_6) = \Phi_B(b_3 h, \xi_5, \pi_5)
 \end{array}$$



# Método de Neri

F. Neri, *Lie algebras and canonical integration*

Department of Physics, Univeristy of Maryland, preprint (1988)

Método de orden 4:  $\|u(kh) - u_k\| = O(h^4)$

$$\begin{array}{lcl}
 (\xi_1, \pi_1) = \Phi_A(a_1 h, \mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) & \rightarrow & (\xi_2, \pi_2) = \Phi_B(b_1 h, \xi_1, \pi_1) \\
 & \swarrow & \\
 (\xi_3, \pi_3) = \Phi_A(a_2 h, \xi_2, \pi_2) & \rightarrow & (\xi_4, \pi_4) = \Phi_B(b_2 h, \xi_3, \pi_3) \\
 & \swarrow & \\
 (\xi_5, \pi_5) = \Phi_A(a_3 h, \xi_4, \pi_4) & \rightarrow & (\xi_6, \pi_6) = \Phi_B(b_3 h, \xi_5, \pi_5) \\
 & \swarrow & \\
 (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) = \Phi_A(a_4 h, \xi_6, \pi_6) & & 
 \end{array}$$

# Método de Neri

Cálculo de los pasos temporales

# Método de Neri

Cálculo de los pasos temporales

$$a_1 = a_4 = \frac{x_1}{2} \quad a_2 = a_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}$$

$$b_1 = b_3 = x_1 \quad b_2 = x_0$$

# Método de Neri

Cálculo de los pasos temporales

$$a_1 = a_4 = \frac{x_1}{2} \quad a_2 = a_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}$$
$$b_1 = b_3 = x_1 \quad b_2 = x_0$$

$(x_0, x_1)$  solución del sistema

$$\begin{cases} x_0 + 2x_1 = 1 \\ x_0^3 + 2x_1^3 = 0 \end{cases}$$

# Método de Neri

Cálculo de los pasos temporales

$$a_1 = a_4 = \frac{x_1}{2} \quad a_2 = a_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}$$

$$b_1 = b_3 = x_1 \quad b_2 = x_0$$

$(x_0, x_1)$  solución del sistema

$$\begin{cases} x_0 + 2x_1 = 1 \\ x_0^3 + 2x_1^3 = 0 \end{cases}$$

$$x_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}$$

# Método de Neri

Cálculo de los pasos temporales

$$a_1 = a_4 = \frac{x_1}{2} \quad a_2 = a_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}$$

$$b_1 = b_3 = x_1 \quad b_2 = x_0$$

$(x_0, x_1)$  solución del sistema

$$\begin{cases} x_0 + 2x_1 = 1 \\ x_0^3 + 2x_1^3 = 0 \end{cases}$$

$$x_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \quad \text{única solución real!}$$

# Método de Yoshida

Integradores de orden par arbitrario

H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*,  
Physics Letters A **150**, 1990.

# Método de Yoshida

Integradores de orden par arbitrario

H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*,  
Physics Letters A **150**, 1990.

Se construyen en forma inductiva:

$$\Phi_{2n+2}(h) = \Phi_{2n}(z_1 h) \circ \Phi_{2n}(z_0 h) \circ \Phi_{2n}(z_1 h)$$



# Método de Yoshida

Integradores de orden par arbitrario

H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*,  
 Physics Letters A **150**, 1990.

Se construyen en forma inductiva:

$$\Phi_{2n+2}(h) = \Phi_{2n}(z_1 h) \circ \Phi_{2n}(z_0 h) \circ \Phi_{2n}(z_1 h)$$

Donde  $z_0, z_1$  resuelven

$$\begin{cases} z_0 + 2 z_1 = 1 \\ z_0^{2n+1} + 2 z_1^{2n+1} = 0 \end{cases}$$

# Método de Yoshida

Integradores de orden par arbitrario

H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*,  
 Physics Letters A **150**, 1990.

Se construyen en forma inductiva:

$$\Phi_{2n+2}(h) = \Phi_{2n}(z_1 h) \circ \Phi_{2n}(z_0 h) \circ \Phi_{2n}(z_1 h)$$

Donde  $z_0, z_1$  resuelven

$$\begin{cases} z_0 + 2 z_1 = 1 \\ z_0^{2n+1} + 2 z_1^{2n+1} = 0 \end{cases}$$

Tienen pasos negativos!

# Método de Yoshida

Integradores de orden par arbitrario

H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*,  
 Physics Letters A **150**, 1990.

Se construyen en forma inductiva:

$$\Phi_{2n+2}(h) = \Phi_{2n}(z_1 h) \circ \Phi_{2n}(z_0 h) \circ \Phi_{2n}(z_1 h)$$

Donde  $z_0, z_1$  resuelven

$$\begin{cases} z_0 + 2 z_1 = 1 \\ z_0^{2n+1} + 2 z_1^{2n+1} = 0 \end{cases}$$

Tienen pasos negativos!

$$z_0 = -\frac{2^{1/(2n+1)}}{2 - 2^{1/(2n+1)}}, \quad z_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/(2n+1)}}$$

# Método de Yoshida

Integrador de orden  $2n$ : requiere  $3^{n-1} + 1$  pasos

# Método de Yoshida

Integrador de orden  $2n$ : requiere  $3^{n-1} + 1$  pasos

No es óptimo:

para orden 6 existen integradores de 8 pasos (10)

para orden 8 existen integradores de 16 pasos (28)

# Expansión en serie

Exponencial de  $A + B$

$$e^{h(A+B)} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

# Expansión en serie

Exponencial de  $A + B$

$$e^{h(A+B)} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

Fórmula de Lie

$$e^{hB}e^{hA} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + 2BA + B^2) + O(h^3)$$

# Expansión en serie

Exponencial de  $A + B$

$$e^{h(A+B)} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$

Fórmula de Lie

$$e^{hB}e^{hA} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + 2BA + B^2) + O(h^3)$$

Fórmula de Strang

$$e^{h/2A}e^{hB}e^{h/2A} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3)$$



# Expansión en serie: caso general

Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff:  $e^{hB}e^{hA} = e^{C(h)}$

$$\begin{aligned} C(h) &= h(A + B) + \frac{h^2}{2}[A, B] \\ &+ \frac{h^3}{12}([A, [A, B]] + [B, [B, A]]) + \dots \end{aligned}$$

# Expansión en serie: caso general

Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff:  $e^{hB}e^{hA} = e^{C(h)}$

$$C(h) = h(A + B) + \frac{h^2}{2}[A, B] + \frac{h^3}{12}([A, [A, B]] + [B, [B, A]]) + \dots$$

Aplicando BCH recursivamente:  $e^{h/2A}e^{hB}e^{h/2A} = e^{C_S(h)}$

$$C_S(h) = h(A + B) - \frac{h^3}{24}([A, [A, B]] - 2[B, [B, A]]) + \dots$$

# Expansión en serie: caso general

$A, B$  matrices

$$\text{Orden 1: } [A, B] = -[B, A] = AB - BA$$

# Expansión en serie: caso general

$A, B$  matrices

Orden 1:  $[A, B] = -[B, A] = AB - BA$

Orden 2:  $[A, [A, B]], [B, [A, B]]$

# Expansión en serie: caso general

$A, B$  matrices

Orden 1:  $[A, B] = -[B, A] = AB - BA$

Orden 2:  $[A, [A, B]], [B, [A, B]]$

Orden  $k$ :  $[A, L_{k-1}], [B, L_{k-1}]$  con  $L_{k-1}$  de orden  $k - 1$

# Expansión en serie: caso general

$A, B$  matrices

Orden 1:  $[A, B] = -[B, A] = AB - BA$

Orden 2:  $[A, [A, B]], [B, [A, B]]$

Orden  $k$ :  $[A, L_{k-1}], [B, L_{k-1}]$  con  $L_{k-1}$  de orden  $k - 1$

$$e^{b_s h B} e^{a_s h A} \dots e^{b_1 h B} e^{a_1 h A} = e^{C(h)}$$

# Expansión en serie: caso general

$A, B$  matrices

Orden 1:  $[A, B] = -[B, A] = AB - BA$

Orden 2:  $[A, [A, B]], [B, [A, B]]$

Orden  $k$ :  $[A, L_{k-1}], [B, L_{k-1}]$  con  $L_{k-1}$  de orden  $k - 1$

$$e^{b_s h B} e^{a_s h A} \dots e^{b_1 h B} e^{a_1 h A} = e^{C(h)}$$

Si  $a_1 + \dots + a_s = 1$  y  $b_1 + \dots + b_s = 1$

$$C(h) = h(A + B) + h^{q+1} L$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Ecuación diferencial:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = f(\mathbf{u}) = f_A(\mathbf{u}) + f_B(\mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$



# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Ecuación diferencial:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = f(\mathbf{u}) = f_A(\mathbf{u}) + f_B(\mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$

Ecuación integral (solución exacta):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) &= \mathbf{u}_0 + \int_{t_0}^t f(\mathbf{u}(t')) dt' \\ &= \mathbf{u}_0 + \int_{t_0}^t f_A(\mathbf{u}(t')) + f_B(\mathbf{u}(t')) dt' \end{aligned}$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Ecuación diferencial:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = f(\mathbf{u}) = f_A(\mathbf{u}) + f_B(\mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$

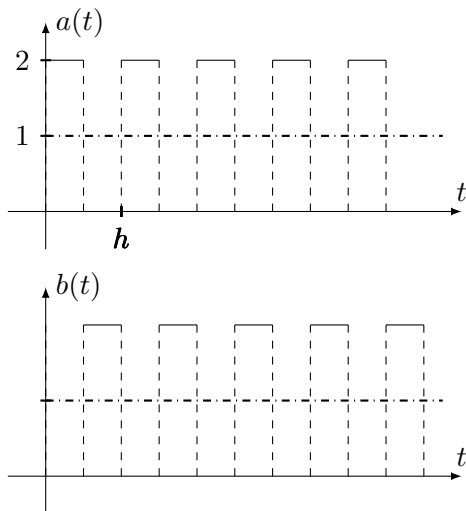
Ecuación integral (solución exacta):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) &= \mathbf{u}_0 + \int_{t_0}^t f(\mathbf{u}(t')) dt' \\ &= \mathbf{u}_0 + \int_{t_0}^t f_A(\mathbf{u}(t')) + f_B(\mathbf{u}(t')) dt' \end{aligned}$$

Ecuación integral (solución aproximada):

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{u}_0 + \int_{t_0}^t a(t') f_A(\mathbf{U}(t')) + b(t') f_B(\mathbf{U}(t')) dt'$$

## Ecuaciones integrales: caso autónomo



# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Cálculo del error:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) - \mathbf{U}(t) &= \int_{t_0}^t [(1-a)f_A(\mathbf{u}) + (1-b)f_B(\mathbf{u})] dt' \\ &+ \int_{t_0}^t [a(f_A(\mathbf{u}) - f_A(\mathbf{U})) + b(f_B(\mathbf{u}) - f_B(\mathbf{U}))] dt' \end{aligned}$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Cálculo del error:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) - \mathbf{U}(t) &= \int_{t_0}^t [(1-a)f_A(\mathbf{u}) + (1-b)f_B(\mathbf{u})] dt' \\ &\quad + \int_{t_0}^t [a(f_A(\mathbf{u}) - f_A(\mathbf{U})) + b(f_B(\mathbf{u}) - f_B(\mathbf{U}))] dt' \end{aligned}$$

Convergencia:

$$\begin{aligned} \left| \int_{t_0}^t (1-a)f_A(\mathbf{u}) dt' \right| &\rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0 \\ \left| \int_{t_0}^t a(f_A(\mathbf{u}) - f_A(\mathbf{U})) dt' \right| &\leq 2L_A \int_{t_0}^t |\mathbf{u} - \mathbf{U}| dt' \end{aligned}$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Si  $f_A(u) = A u$ ,  $f_B(u) = B u$ , la ecuación integral:

$$U(t) = \begin{cases} \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t A U(t') dt', & t \in [t_0, t_0 + h/2] \\ U(t_0 + h/2) + 2 \int_{t_0+h/2}^t B U(t') dt', & t \in [t_0 + h/2, t_0 + h] \end{cases}$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Si  $f_A(u) = A u$ ,  $f_B(u) = B u$ , la ecuación integral:

$$U(t) = \begin{cases} \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t A U(t') dt', & t \in [t_0, t_0 + h/2] \\ U(t_0 + h/2) + 2 \int_{t_0+h/2}^t B U(t') dt', & t \in [t_0 + h/2, t_0 + h] \end{cases}$$

Resolviendo la ecuaciones

$$U(t) = \begin{cases} e^{(t-t_0)2A} \mathbf{u}_0, & t \in [t_0, t_0 + h/2] \\ e^{(t-t_0-h/2)2B} e^{hA} \mathbf{u}_0, & t \in [t_0 + h/2, t_0 + h] \end{cases}$$

# Ecuaciones integrales: caso autónomo

Si  $f_A(u) = A u$ ,  $f_B(u) = B u$ , la ecuación integral:

$$U(t) = \begin{cases} \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t A U(t') dt', & t \in [t_0, t_0 + h/2] \\ U(t_0 + h/2) + 2 \int_{t_0+h/2}^t B U(t') dt', & t \in [t_0 + h/2, t_0 + h] \end{cases}$$

Resolviendo la ecuaciones

$$U(t) = \begin{cases} e^{(t-t_0)2A} \mathbf{u}_0, & t \in [t_0, t_0 + h/2] \\ e^{(t-t_0-h/2)2B} e^{hA} \mathbf{u}_0, & t \in [t_0 + h/2, t_0 + h] \end{cases}$$

$$U(t_0 + h) = e^{hB} e^{hA} \mathbf{u}_0$$



# Ecuaciones integrales: caso no autónomo

Problema no autónomo:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = f(t, \mathbf{u}) = f_A(t, \mathbf{u}) + f_B(t, \mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$

# Ecuaciones integrales: caso no autónomo

Problema no autónomo:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = f(t, \mathbf{u}) = f_A(t, \mathbf{u}) + f_B(t, \mathbf{u}) \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$

Problema autónomo equivalente:

$$\begin{cases} \dot{\tau} = 1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \\ \dot{\mathbf{u}} = f(\tau, \mathbf{u}) = f_A(\tau, \mathbf{u}) + f_B(\tau, \mathbf{u}) \\ \tau(t_0) = t_0 \\ \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0 \end{cases}$$

# Ecuaciones integrales: caso no autónomo

Para  $t \in [t_0, t_0 + h/2]$

$$\tau(t) = t_0 + 2 \int_{t_0}^t \frac{1}{2} dt' = t$$

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t f_A(\underbrace{\tau(t')}_{t'}, \mathbf{U}(t')) dt'$$

## Ecuaciones integrales: caso no autónomo

Para  $t \in [t_0, t_0 + h/2]$

$$\tau(t) = t_0 + 2 \int_{t_0}^t \frac{1}{2} dt' = t$$

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t \underbrace{f_A(\tau(t'), \mathbf{U}(t'))}_{t'} dt'$$

Para  $t \in [t_0 + h/2, t_0 + h]$

$$\tau(t) = t_0 + \frac{h}{2} + 2 \int_{t_0+h/2}^t \frac{1}{2} dt' = t$$

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{u}_0 + 2 \int_{t_0}^t \underbrace{f_B(\tau(t'), \mathbf{U}(t'))}_{t'} dt'$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Para  $x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$

$$i u_t(t, \mathbf{x}) = -\nabla^2 u(t, \mathbf{x}) + F(u(t, \mathbf{x}))$$
$$u(t_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x})$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Para  $x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}i u_t(t, \mathbf{x}) &= -\nabla^2 u(t, \mathbf{x}) + F(u(t, \mathbf{x})) \\ u(t_0, \mathbf{x}) &= u_0(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Problema (A)

$$\begin{cases} i u_t(t, \mathbf{x}) = -\nabla^2 u(t, \mathbf{x}) \\ u(t_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Para  $x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} i u_t(t, \mathbf{x}) &= -\nabla^2 u(t, \mathbf{x}) + F(u(t, \mathbf{x})) \\ u(t_0, \mathbf{x}) &= u_0(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Problema (A)

$$\begin{cases} i u_t(t, \mathbf{x}) = -\nabla^2 u(t, \mathbf{x}) \\ u(t_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

Problema (B)

$$\begin{cases} i u_t(t, \mathbf{x}) = F(u(t, \mathbf{x})) \\ u(t_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):



# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):

- Diferencias finitas

$$u(t_{n+1}, \mathbf{x}_m) = u(t_n, \mathbf{x}_m) + k A u(t_n, \mathbf{x}_m)$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):

- Diferencias finitas

$$u(t_{n+1}, \mathbf{x}_m) = u(t_n, \mathbf{x}_m) + k A u(t_n, \mathbf{x}_m)$$

- Mediante desarrollo de Fourier: series, transformada, DFT (FFT)

$$\hat{u}(t, \boldsymbol{\xi}) = \exp\left(-i|\boldsymbol{\xi}|^2(t - t_0)\right) \hat{u}_0(\boldsymbol{\xi})$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):

- Diferencias finitas

$$u(t_{n+1}, \mathbf{x}_m) = u(t_n, \mathbf{x}_m) + k A u(t_n, \mathbf{x}_m)$$

- Mediante desarrollo de Fourier: series, transformada, DFT (FFT)

$$\hat{u}(t, \boldsymbol{\xi}) = \exp\left(-i|\boldsymbol{\xi}|^2(t - t_0)\right) \hat{u}_0(\boldsymbol{\xi})$$

Problema (B):

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):

- Diferencias finitas

$$u(t_{n+1}, \mathbf{x}_m) = u(t_n, \mathbf{x}_m) + k A u(t_n, \mathbf{x}_m)$$

- Mediante desarrollo de Fourier: series, transformada, DFT (FFT)

$$\hat{u}(t, \boldsymbol{\xi}) = \exp\left(-i|\boldsymbol{\xi}|^2(t - t_0)\right) \hat{u}_0(\boldsymbol{\xi})$$

Problema (B):

- Caso particular  $F(u) = f(|u|) u$  (NLS cúbica:  $f(\rho) = \rho^2$ )

$$u(t, \mathbf{x}) = \exp(-i f(|u_0|)(t - t_0)) u_0(\mathbf{x})$$

# Ecuación de Schrödinger no lineal:

Problema (A):

- Diferencias finitas

$$u(t_{n+1}, \mathbf{x}_m) = u(t_n, \mathbf{x}_m) + k A u(t_n, \mathbf{x}_m)$$

- Mediante desarrollo de Fourier: series, transformada, DFT (FFT)

$$\hat{u}(t, \boldsymbol{\xi}) = \exp\left(-i|\boldsymbol{\xi}|^2(t - t_0)\right) \hat{u}_0(\boldsymbol{\xi})$$

Problema (B):

- Caso particular  $F(u) = f(|u|) u$  (NLS cúbica:  $f(\rho) = \rho^2$ )

$$u(t, \mathbf{x}) = \exp(-i f(|u_0|)(t - t_0)) u_0(\mathbf{x})$$

- Integración numérica de EDO (Runge-Kutta, Multipasos, BDF)

$$u(t_n, \mathbf{x}_m) = u(t_{n-1}, \mathbf{x}_m) + k \Phi(t_{n-1}, u(t_{n-1}, \mathbf{x}_m))$$

# Problema A: diferencias finitas

- Discretización de  $u_t$

$$u_t(x_m, t_n) \cong \frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{k}$$

# Problema A: diferencias finitas

- Discretización de  $u_t$

$$u_t(x_m, t_n) \cong \frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{k}$$

- Discretización de  $u_{xx}$

# Problema A: diferencias finitas

## ■ Discretización de $u_t$

$$u_t(x_m, t_n) \cong \frac{u(x_m, t_{n+1}) - u(x_m, t_n)}{k}$$

## ■ Discretización de $u_{xx}$

### - Explícita

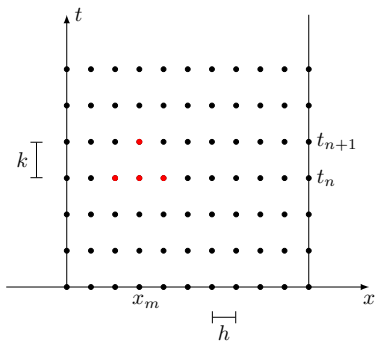
$$u_{xx}(x_m, t_n) \cong \frac{u(x_{m+1}, t_n) - 2u(x_m, t_n) + u(x_{m-1}, t_n)}{h^2}$$

### - Implícita

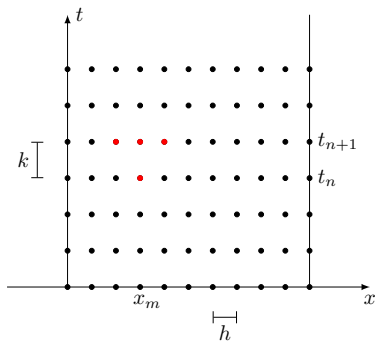
$$u_{xx}(x_m, t_{n+1}) \cong \frac{u(x_{m+1}, t_{n+1}) - 2u(x_m, t_{n+1}) + u(x_{m-1}, t_{n+1})}{h^2}$$



# Problema A: diferencias finitas



(a) Método explícito



(b) Método implícito

# Ecuación de Schrödinger: diferencias finitas

Si  $u^n = (\dots, u_{m-1}^n, u_m^n, u_{m+1}^n, \dots)$  y

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & 2 & -1 & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & -1 & 2 & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

## Ecuación de Schrödinger: diferencias finitas

Si  $u^n = (\dots, u_{m-1}^n, u_m^n, u_{m+1}^n, \dots)$  y

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & 2 & -1 & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & -1 & 2 & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Método explícito:

$$u^{n+1} = \left( I - \frac{k}{2h^2} A \right) u^n$$

## Ecuación de Schrödinger: diferencias finitas

Si  $u^n = (\dots, u_{m-1}^n, u_m^n, u_{m+1}^n, \dots)$  y

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & 2 & -1 & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & -1 & 2 & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Método explícito:

$$u^{n+1} = \left( I - \frac{k}{2h^2} A \right) u^n$$

Método implícito:

$$\left( I + \frac{k}{2h^2} A \right) u^{n+1} = u^n$$

# Método Crank-Nicolson

$$i \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} = \frac{-u_{m+1}^n + 2u_m^n - u_{m-1}^n}{2h^2} + \frac{-u_{m+1}^{n+1} + 2u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}}{2h^2}$$

# Método Crank-Nicolson

$$i \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} = \frac{-u_{m+1}^n + 2u_m^n - u_{m-1}^n}{2h^2} + \frac{-u_{m+1}^{n+1} + 2u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}}{2h^2}$$

En forma matricial:

$$\left( I + \frac{ik}{2} A \right) u^{n+1} = \left( I - \frac{ik}{2} A \right) u^n$$

# Método Crank-Nicolson

$$i \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} = \frac{-u_{m+1}^n + 2u_m^n - u_{m-1}^n}{2h^2} + \frac{-u_{m+1}^{n+1} + 2u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}}{2h^2}$$

En forma matricial:

$$\left( I + \frac{ik}{2} A \right) u^{n+1} = \left( I - \frac{ik}{2} A \right) u^n$$

$$u^{n+1} = \left( I + \frac{ik}{2} A \right)^{-1} \cdot \left( I - \frac{ik}{2} A \right) u^n$$

## Ecuación de Schrödinger: diferencias finitas

Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(t, 0) = 0, u(t, L) = 0$

$$A_{\text{Dir}} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$



## Ecuación de Schrödinger: diferencias finitas

Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(t, 0) = 0, u(t, L) = 0$

$$A_{\text{Dir}} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Condiciones de frontera periódicas:  $u(t, 0) = u(t, L)$

$$A_{\text{per}} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$
- Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(0) = 0, u(L) = 0$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$
- Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(0) = 0, u(L) = 0$

Autovalores:  $\lambda_p = \pi^2 p^2 / L^2$

Autofunciones:  $u^{(p)}(x) = \sin(\pi x p / L)$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$
- Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(0) = 0, u(L) = 0$   
Autovalores:  $\lambda_p = \pi^2 p^2 / L^2$   
Autofunciones:  $u^{(p)}(x) = \sin(\pi x p / L)$
- Condiciones de frontera periódicas:  $u(0) = u(L)$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$
- Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(0) = 0, u(L) = 0$   
Autovalores:  $\lambda_p = \pi^2 p^2 / L^2$   
Autofunciones:  $u^{(p)}(x) = \sin(\pi x p / L)$
- Condiciones de frontera periódicas:  $u(0) = u(L)$   
Autovalores:  $\lambda_p = 4\pi^2 p^2 / L^2$

# Espectro del laplaciano

- Operador  $L = -\frac{d^2}{dx^2}$
- Condiciones de frontera Dirichlet:  $u(0) = 0, u(L) = 0$   
Autovalores:  $\lambda_p = \pi^2 p^2 / L^2$   
Autofunciones:  $u^{(p)}(x) = \sin(\pi x p / L)$
- Condiciones de frontera periódicas:  $u(0) = u(L)$   
Autovalores:  $\lambda_p = 4\pi^2 p^2 / L^2$   
Autofunciones:  $u^{(p)}(x) = e^{i2\pi xp / L}$

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :



# Espectro de las matrices

■  $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

# Espectro de las matrices

■  $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

- $A_{\text{per}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ :

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

- $A_{\text{per}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ :

Para  $p = 0, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / N)$

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

- $A_{\text{per}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ :

Para  $p = 0, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / N)$

Autovector  $u_j^{(p)} = e^{i 2 j p \pi / N}$ , con  $j = 0, \dots, N - 1$

# Espectro de las matrices

- $A_{\text{Dir}} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ :

Para  $p = 1, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / (2N))$

Autovector  $u_j^{(p)} = \sin(j p \pi / N)$ , con  $j = 1, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

- $A_{\text{per}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ :

Para  $p = 0, \dots, N - 1$ , autovalor  $\lambda_p = \frac{4}{h^2} \sin^2(p \pi / N)$

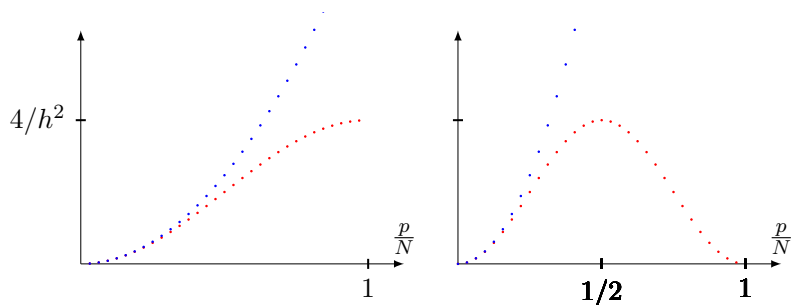
Autovector  $u_j^{(p)} = e^{i 2 j p \pi / N}$ , con  $j = 0, \dots, N - 1$

$\lambda_p \cong 4 \pi^2 p^2 / (h N)^2$  si  $p \ll N$

# Espectro de las matrices

Comparación de los autovalores de  $L$  y  $A$ .

A la izquierda con condiciones de Dirichlet, a la derecha con condiciones de periódicas





# Dispersión numérica

Espectro de la matriz de Crank-Nicolson:  $\left(I + \frac{ik}{2}A\right)^{-1} \cdot \left(I - \frac{ik}{2}A\right)$

# Dispersión numérica

Espectro de la matriz de Crank-Nicolson:  $\left(I + \frac{ik}{2}A\right)^{-1} \cdot \left(I - \frac{ik}{2}A\right)$

Para  $p = 1, \dots, N$

$$\sigma_p = \frac{1 - ik \lambda_p/2}{1 + ik \lambda_p/2} = \frac{1 - i 2 k/h^2 \sin^2(p \pi/N)}{1 + i 2 k/h^2 \sin^2(p \pi/N)} \in \mathbb{T}$$

# Dispersión numérica

Espectro de la matriz de Crank-Nicolson:  $\left(I + \frac{ik}{2}A\right)^{-1} \cdot \left(I - \frac{ik}{2}A\right)$

Para  $p = 1, \dots, N$

$$\sigma_p = \frac{1 - ik \lambda_p/2}{1 + ik \lambda_p/2} = \frac{1 - i 2k/h^2 \sin^2(p\pi/N)}{1 + i 2k/h^2 \sin^2(p\pi/N)} \in \mathbb{T}$$

Comparación entre la dispersión exacta y numérica:

$$e^{-i4\pi k p^2/L^2} = \sigma_p + O\left(\frac{p^4}{N^4}\right) = 1 - 4i\pi^2 \frac{k}{h^2} \frac{p^2}{N^2} + O\left(\frac{p^4}{N^4}\right)$$

## Ejemplo:

Ecuación:  $iu_t = -u_{xx}$  con  $u(t, 0) = u(t, 1)$  ( $L = 1$ )

# Ejemplo:

Ecuación:  $iu_t = -u_{xx}$  con  $u(t, 0) = u(t, 1)$  ( $L = 1$ )

Dato inicial:  $u_0(x) = \sin(2\pi x) - 0.2 \sin(4\pi x)$

## Ejemplo:

Ecuación:  $iu_t = -u_{xx}$  con  $u(t, 0) = u(t, 1)$  ( $L = 1$ )

Dato inicial:  $u_0(x) = \sin(2\pi x) - 0.2 \sin(4\pi x)$

Solución exacta:

$$u(t, x) = e^{-i4\pi^2 t} \sin(2\pi x) - 0.2 e^{-i16\pi^2 t} \sin(4\pi x)$$

## Ejemplo:

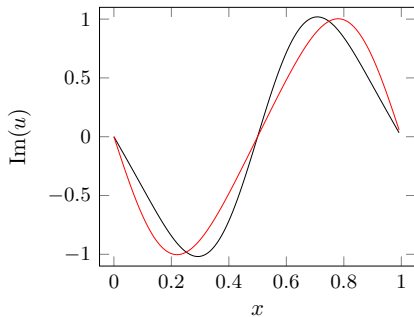
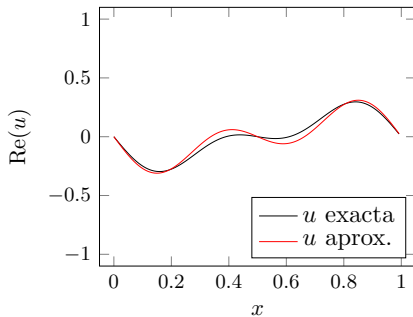
Ecuación:  $iu_t = -u_{xx}$  con  $u(t, 0) = u(t, 1)$  ( $L = 1$ )

Dato inicial:  $u_0(x) = \sin(2\pi x) - 0.2 \sin(4\pi x)$

Solución exacta:

$$u(t, x) = e^{-i4\pi^2 t} \sin(2\pi x) - 0.2 e^{-i16\pi^2 t} \sin(4\pi x)$$

$L = 1, t = 1, N = 128, k = 0.00195$



# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$



# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$

$$\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1})) \quad t_j = jh = jT/N$$

# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$

$$\mathbf{u} = (u(x_0) \ u(x_1) \ \dots \ u(x_{N-1})) \quad t_j = jh = jT/N$$

calculamos  $c_p = \hat{u}_p$  por trapecios:

# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$

$$\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1})) \quad t_j = jh = jT/N$$

calculamos  $c_p = \hat{u}_p$  por trapecios:

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / N}$$

# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$

$$\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1})) \quad t_j = jh = jT/N$$

calculamos  $c_p = \hat{u}_p$  por trapecios:

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-i2\pi j p/N}$$

Sucesión periódica:  $\hat{u}_{p+N} = \hat{u}_p$ , dado que  $e^{-i2\pi j} = 1$  y por lo tanto

$$e^{-i2\pi j(p+N)/N} = e^{-i2\pi j p/N - i2\pi j} = e^{-i2\pi j p/N} e^{-i2\pi j} = e^{-i2\pi j p/N}.$$

# Transformada discreta de Fourier

Discretización:  $u(x) \mapsto \mathbf{u} \in \mathbb{C}^N$

$$\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1})) \quad t_j = jh = jT/N$$

calculamos  $c_p = \hat{u}_p$  por trapecios:

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-i2\pi j p/N}$$

Sucesión periódica:  $\hat{u}_{p+N} = \hat{u}_p$ , dado que  $e^{-i2\pi j} = 1$  y por lo tanto

$$e^{-i2\pi j(p+N)/N} = e^{-i2\pi j p/N - i2\pi j} = e^{-i2\pi j p/N} e^{-i2\pi j} = e^{-i2\pi j p/N}.$$

Transformada inversa

$$u(x_j) = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{u}_p e^{i2\pi j p/N}$$

# Relación con los coeficientes de Fourier

Si  $\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1}))$        $x_j = jh = jT/N$

# Relación con los coeficientes de Fourier

Si  $\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1}))$        $x_j = jh = jT/N$

Si  $N$  es impar

$$\hat{\mathbf{u}} = N (c_0 c_1 \dots c_n c_{-n} \dots c_{-1})$$

# Relación con los coeficientes de Fourier

Si  $\mathbf{u} = (u(x_0) u(x_1) \dots u(x_{N-1}))$        $x_j = jh = jT/N$

Si  $N$  es impar

$$\hat{\mathbf{u}} = N (c_0 c_1 \dots c_n c_{-n} \dots c_{-1})$$

Si  $N$  es par

$$\hat{\mathbf{u}} = N (c_0 c_1 \dots c_{n-1} a_n c_{-n+1} \dots c_{-1})$$



# Transformada discreta de Fourier

Otras definiciones:

$$\hat{x}_p = \frac{1}{N^\beta} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{\pm i 2 \pi j p / N}, \quad x_j = \frac{1}{N^{1-\beta}} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{x}_p e^{\mp i 2 \pi j p / N}.$$

# Transformada discreta de Fourier

Otras definiciones:

$$\hat{x}_p = \frac{1}{N^\beta} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{\pm i 2 \pi j p / N}, \quad x_j = \frac{1}{N^{1-\beta}} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{x}_p e^{\mp i 2 \pi j p / N}.$$

La identidad de Parseval es

$$\|\mathbf{x}\|^2 = N^{2\beta-1} \|\hat{\mathbf{x}}\|^2$$

# Transformada discreta de Fourier

Otras definiciones:

$$\hat{x}_p = \frac{1}{N^\beta} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{\pm i 2 \pi j p / N}, \quad x_j = \frac{1}{N^{1-\beta}} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{x}_p e^{\mp i 2 \pi j p / N}.$$

La identidad de Parseval es

$$\|\mathbf{x}\|^2 = N^{2\beta-1} \|\hat{\mathbf{x}}\|^2$$

Para la función `fft` de Python, la opción `norm = None` equivale a  $\beta = 0$

# Transformada discreta de Fourier

Otras definiciones:

$$\hat{x}_p = \frac{1}{N^\beta} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{\pm i 2 \pi j p / N}, \quad x_j = \frac{1}{N^{1-\beta}} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{x}_p e^{\mp i 2 \pi j p / N}.$$

La identidad de Parseval es

$$\|\mathbf{x}\|^2 = N^{2\beta-1} \|\hat{\mathbf{x}}\|^2$$

Para la función `fft` de Python, la opción `norm = None` equivale a  $\beta = 0$

Para  $\beta = 1/2$  la transformada discreta de Fourier mantiene la norma

# Transformada discreta de Fourier

Otras definiciones:

$$\hat{x}_p = \frac{1}{N^\beta} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{\pm i 2 \pi j p / N}, \quad x_j = \frac{1}{N^{1-\beta}} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{x}_p e^{\mp i 2 \pi j p / N}.$$

La identidad de Parseval es

$$\|\mathbf{x}\|^2 = N^{2\beta-1} \|\hat{\mathbf{x}}\|^2$$

Para la función `fft` de Python, la opción `norm = None` equivale a  $\beta = 0$

Para  $\beta = 1/2$  la transformada discreta de Fourier mantiene la norma

La opción `norm = 'ortho'` equivale a  $\beta = 1/2$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

$$\text{Si } u(x) = \frac{1}{1 - \frac{3}{5} \cos(2\pi x)} = \frac{5}{4} + \frac{5}{2} \sum_{p=1}^{\infty} 3^{-p} \cos(2p\pi x)$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

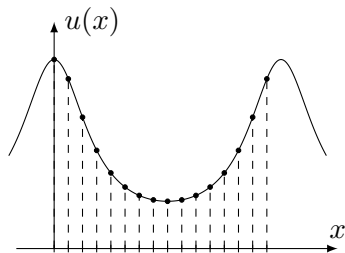
$$\text{Si } u(x) = \frac{1}{1 - \frac{3}{5} \cos(2\pi x)} = \frac{5}{4} + \frac{5}{2} \sum_{p=1}^{\infty} 3^{-p} \cos(2p\pi x)$$

$\mathbf{u} = (u(x_0), u(x_1), \dots, u(x_{15}))$  donde  $x_j = j/16, j = 0, \dots, 15$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

$$\text{Si } u(x) = \frac{1}{1 - \frac{3}{5} \cos(2\pi x)} = \frac{5}{4} + \frac{5}{2} \sum_{p=1}^{\infty} 3^{-p} \cos(2p\pi x)$$

$\mathbf{u} = (u(x_0), u(x_1), \dots, u(x_{15}))$  donde  $x_j = j/16, j = 0, \dots, 15$





# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $u$  su transformada es

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $u$  su transformada es

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

$$\hat{u} = (20., 6.667, 2.222, 0.741, 0.247, \dots, 0.247, 0.741, 2.222, 6.667)$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $u$  su transformada es

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

$$\hat{u} = (20., 6.667, 2.222, 0.741, 0.247, \dots, 0.247, 0.741, 2.222, 6.667)$$

$$\hat{u}_0 \cong 16 c_0, \hat{u}_1 \cong 16 c_1, \hat{u}_2 \cong 16 c_2, \dots, \hat{u}_7 \cong 16 c_7$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $\mathbf{u}$  su transformada es

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

$$\hat{\mathbf{u}} = (20., 6.667, 2.222, 0.741, 0.247, \dots, 0.247, 0.741, 2.222, 6.667)$$

$$\hat{u}_0 \cong 16 c_0, \quad \hat{u}_1 \cong 16 c_1, \quad \hat{u}_2 \cong 16 c_2, \dots, \quad \hat{u}_7 \cong 16 c_7$$

$$\hat{u}_9 \cong 16 c_{-7}, \quad \hat{u}_{10} \cong 16 c_{-6}, \dots, \quad \hat{u}_{15} \cong 16 c_{-1}$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $u$  su transformada es

$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

$$\hat{u} = (20., 6.667, 2.222, 0.741, 0.247, \dots, 0.247, 0.741, 2.222, 6.667)$$

$$\hat{u}_0 \cong 16 c_0, \quad \hat{u}_1 \cong 16 c_1, \quad \hat{u}_2 \cong 16 c_2, \dots, \quad \hat{u}_7 \cong 16 c_7$$

$$\hat{u}_9 \cong 16 c_{-7}, \quad \hat{u}_{10} \cong 16 c_{-6}, \dots, \quad \hat{u}_{15} \cong 16 c_{-1}$$

$$\hat{x}_8 \cong 16 (c_8 + c_{-8}) \cong 16 a_8$$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

Para el vector  $u$  su transformada es

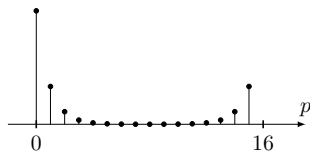
$$\hat{u}_p = \sum_{j=0}^{15} u(x_j) e^{-i 2 \pi j p / 16}$$

$$\hat{u} = (20., 6.667, 2.222, 0.741, 0.247, \dots, 0.247, 0.741, 2.222, 6.667)$$

$$\hat{u}_0 \cong 16 c_0, \quad \hat{u}_1 \cong 16 c_1, \quad \hat{u}_2 \cong 16 c_2, \dots, \quad \hat{u}_7 \cong 16 c_7$$

$$\hat{u}_9 \cong 16 c_{-7}, \quad \hat{u}_{10} \cong 16 c_{-6}, \dots, \quad \hat{u}_{15} \cong 16 c_{-1}$$

$$\hat{x}_8 \cong 16 (c_8 + c_{-8}) \cong 16 a_8$$



# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

- $a_0 = c_0 \cong \hat{u}_0/16$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

- $a_0 = c_0 \cong \hat{u}_0/16$
- $a_1 = c_1 + c_{-1} \cong (\hat{u}_1 + \hat{u}_{15})/16$



# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

- $a_0 = c_0 \cong \hat{u}_0/16$
- $a_1 = c_1 + c_{-1} \cong (\hat{u}_1 + \hat{u}_{15})/16$
- $\vdots$
- $a_7 = c_7 + c_{-7} \cong (\hat{u}_7 + \hat{u}_9)/16$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

- $a_0 = c_0 \cong \hat{u}_0/16$
- $a_1 = c_1 + c_{-1} \cong (\hat{u}_1 + \hat{u}_{15})/16$
- $\vdots$
- $a_7 = c_7 + c_{-7} \cong (\hat{u}_7 + \hat{u}_9)/16$
- $a_8 = c_8 + c_{-8} \cong \hat{u}_8/16$

# Transformada discreta de Fourier: ejemplo

- $a_0 = c_0 \cong \hat{u}_0/16$
- $a_1 = c_1 + c_{-1} \cong (\hat{u}_1 + \hat{u}_{15})/16$
- ⋮
- $a_7 = c_7 + c_{-7} \cong (\hat{u}_7 + \hat{u}_9)/16$
- $a_8 = c_8 + c_{-8} \cong \hat{u}_8/16$

$n$	$a_n$	$a_n$ (DFT)	$n$	$a_n$	$a_n$ (DFT)
0	1.250	1.250	5	$1.029 \times 10^{-2}$	$1.030 \times 10^{-2}$
1	$8.333 \times 10^{-1}$	$8.333 \times 10^{-1}$	6	$3.429 \times 10^{-3}$	$3.472 \times 10^{-3}$
2	$2.778 \times 10^{-1}$	$2.778 \times 10^{-1}$	7	$1.143 \times 10^{-3}$	$1.270 \times 10^{-3}$
3	$9.259 \times 10^{-2}$	$9.259 \times 10^{-2}$	8	$3.810 \times 10^{-4}$	$3.810 \times 10^{-4}$
4	$3.086 \times 10^{-2}$	$3.087 \times 10^{-2}$			

## Ejemplo: NLS

Consideramos el problema NLS

$$\begin{cases} i u_t(t, x) = -\nabla^2 u(t, x) + f(|u(t, x)|) u(t, x), \\ u(t_0, x) = u_0(x), \end{cases}$$

con  $f(\rho) = 4\pi^2 \rho \left( 3 - \frac{32}{25} \rho \right)$  y  $u_0(x) = \frac{1}{1 - \frac{3}{5} \cos(2\pi x)}$ .

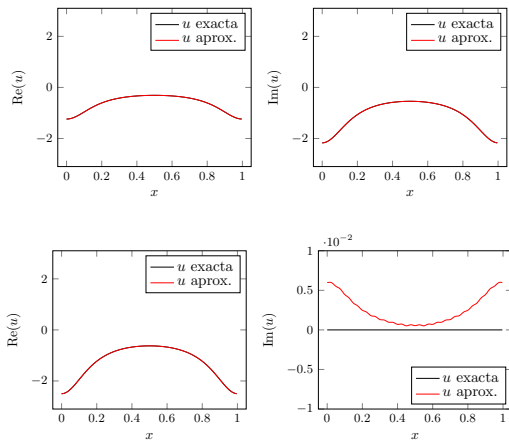
La solución es

$$u(t, x) = \frac{e^{-i4\pi^2 t}}{1 - \frac{3}{5} \cos(2\pi x)}$$

## Ejemplo: NLS

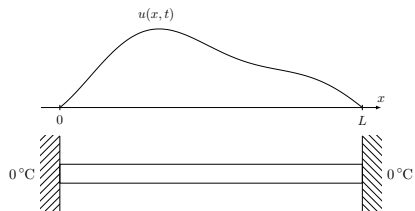
Método de Neri:  $L = 1, M = 256, N = 200, T = 1/(2\pi)$

Figure: Arriba:  $t = T/3$ , abajo:  $t = T/2$



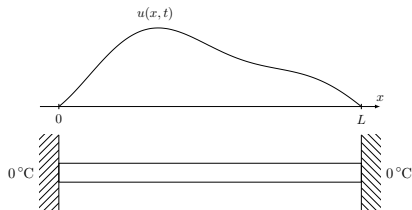
# Transmisión del calor

## Temperatura de una barra (unidimensional)



# Transmisión del calor

## Temperatura de una barra (unidimensional)

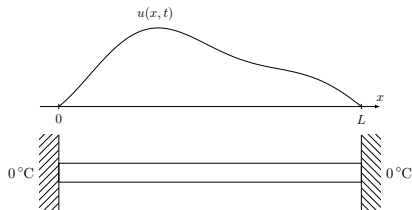


Ecuación del calor:  $0 < x < L, t > 0$

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} \\ u(x, 0) = f(x), \quad u(0, t) = u(L, t) = 0 \end{cases}$$

# Transmisión del calor

Temperatura de una barra (unidimensional)



Ecuación del calor:  $0 < x < L, t > 0$

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} \\ u(x, 0) = f(x), \quad u(0, t) = u(L, t) = 0 \end{cases}$$

¡No se puede resolver para atrás!



# Transmisión del calor

Si desarrollamos en series de Fourier

$$u(t, x) = \sum_{p=1}^{\infty} \hat{u}_p(t) \sin(\pi p x)$$

# Transmisión del calor

Si desarrollamos en series de Fourier

$$u(t, x) = \sum_{p=1}^{\infty} \hat{u}_p(t) \sin(\pi p x)$$

Los coeficientes verifican

$$\begin{cases} \frac{d\hat{u}_p}{dt} = -\pi^2 p^2 \hat{u}_p \\ \hat{u}_p(0) = \hat{f}_p \end{cases}$$

# Transmisión del calor

Si desarrollamos en series de Fourier

$$u(t, x) = \sum_{p=1}^{\infty} \hat{u}_p(t) \sin(\pi p x)$$

Los coeficientes verifican

$$\begin{cases} \frac{d\hat{u}_p}{dt} = -\pi^2 p^2 \hat{u}_p \\ \hat{u}_p(0) = \hat{f}_p \end{cases}$$

La solución verifica

$$u(t, x) = \sum_{p=1}^{\infty} \hat{f}_p e^{-\pi^2 p^2 t} \sin(\pi p x)$$

# Tiempos negativos

D. Goldman and T. J. Kaper. *Nth-order operator splitting schemes and nonreversible systems*. *SIAM Journal on Numerical Analysis* **33** (1), 349-367, 1996.

Si el método de la forma

$$\phi_B(b_s h) \circ \phi_A(a_s h) \circ \cdots \circ \phi_B(b_1 h) \circ \phi_A(a_1 h)$$

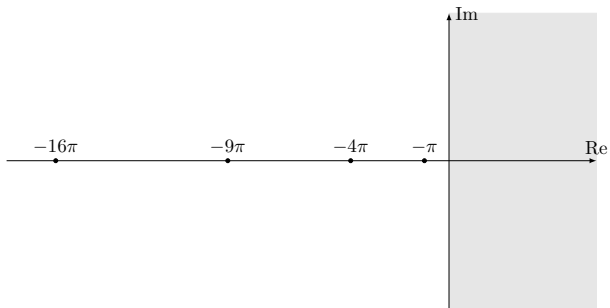
es de orden mayor o igual que 3, entonces

$$\min_{1 \leq m \leq s} a_m < 0, \quad \min_{1 \leq m \leq s} b_m < 0$$

# Extensión de semigrupos

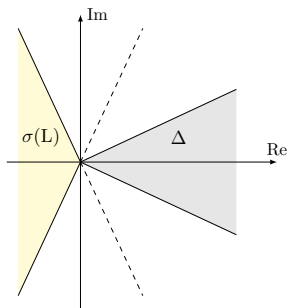
Solución de tiempos complejos: si  $z \in \mathbb{C}$ ,  $\text{Re}(z) > 0$

$$u(z, x) = \sum_{p=1}^{\infty} \hat{f}_p e^{-\pi^2 p^2 z} \sin(\pi p x)$$



# Extensión de semigrupos

$(\Delta, +)$  es un semigrupo,  $e^{zL} : \Delta \rightarrow \mathcal{B}(X)$  semigrupo fuertemente continuo, analítico en  $\text{int}(\Delta)$



# Pasos complejos

F. Castella, P. Chartier, S. Descombes and G. Vilmart, *Splitting methods with complex times for parabolic equations*, BIT Numer. Math. **49**, 487–508, 2009.

Existen métodos de orden  $p$ , tomando

$$a_1, \dots, a_s, b_1, \dots, b_s \in \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) > 0\}$$

$$\phi_B(b_s h) \circ \phi_A(a_s h) \circ \dots \circ \phi_B(b_1 h) \circ \phi_A(a_1 h)$$

métodos de orden  $2n \leq 8$  ( $\operatorname{Re}(a_m), \operatorname{Re}(b_m) < 0$  si  $n \geq 5$ )

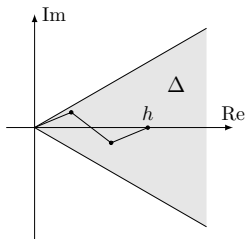
Se necesitan  $s = 3^{n-1} + 1$

# Pasos complejos

## Método de Yoshida

$$\Phi_{2n+2}(h) = \Phi_{2n}(z_3 h) \circ \Phi_{2n}(z_2 h) \circ \Phi_{2n}(z_1 h)$$

con  $z_1 + z_2 + z_3 = 1$ ,  $z_1^{2n+1} + z_2^{2n+1} + z_3^{2n+1} = 0$





L. Aloui, M. Khenissi and G. Vodev, *Smoothing effect for the regularized Schrödinger equation with non-controlled orbits*. *Comm. PDE* **38** (2), 2012.

Ecuación de Schrödinger regularizada:

$$\begin{cases} u_t = i\nabla^2 u - (-\nabla^2)^{1/2} u \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

L. Aloui, M. Khenissi and G. Vodev, *Smoothing effect for the regularized Schrödinger equation with non-controlled orbits*. *Comm. PDE* **38** (2), 2012.

Ecuación de Schrödinger regularizada:

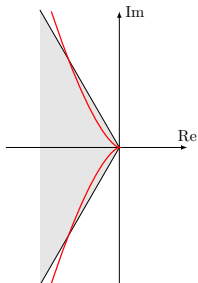
$$\begin{cases} u_t = i\nabla^2 u - (-\nabla^2)^{1/2} u \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Ecuación Korteweg-de Vries-Burgers

$$\begin{cases} u_t = u_{xxx} + \epsilon u_{xx} + uu_x \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

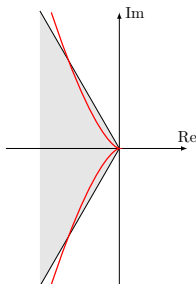
Espectro del operador KdV-B:  $L = \partial_x^3 + \epsilon \partial_x^2$

$$(\widehat{Lu})(\xi) = -(i\xi^3 + \epsilon\xi^2)\hat{u}(\xi)$$



Espectro del operador KdV-B:  $L = \partial_x^3 + \epsilon \partial_x^2$

$$(\widehat{Lu})(\xi) = -(i\xi^3 + \epsilon\xi^2)\hat{u}(\xi)$$



No hay extensión analítica!

S. Chin, *Multi-product splitting and Runge-Kutta-Nyström integrators*, *Celestial Mech. Dynam. Astronom.* **106**, 391–406, 2010.

$$\begin{cases} \dot{x} = p \\ \dot{p} = -\nabla_x V(t, x) \\ x(t_0) = x_0, p(t_0) = p_0 \end{cases}$$

$$\Phi(h) = \sum_{m=1}^s \gamma_m \Phi_m(h)$$

$$\Phi_m(h) = \Phi_B(a_{m,s}h) \circ \cdots \circ \Phi_B(b_{m,1}h) \circ \Phi_A(a_{m,1}h)$$

# Problemas variacionales

Puntos de equilibrio de sistemas hamiltonianos

$$\begin{cases} \min H(q) \\ G(q) = a \end{cases}$$

# Problemas variacionales

Puntos de equilibrio de sistemas hamiltonianos

$$\begin{cases} \min H(q) \\ G(q) = a \end{cases}$$

Descenso por gradiente proyectado

$$\dot{q} = -\nabla^\perp H(q) = -\nabla H(q) + \frac{\nabla H(q) \cdot \nabla G(q)}{\nabla G(q) \cdot \nabla G(q)} \nabla G(q)$$

# Problemas variacionales

Puntos de equilibrio de sistemas hamiltonianos

$$\begin{cases} \min H(q) \\ G(q) = a \end{cases}$$

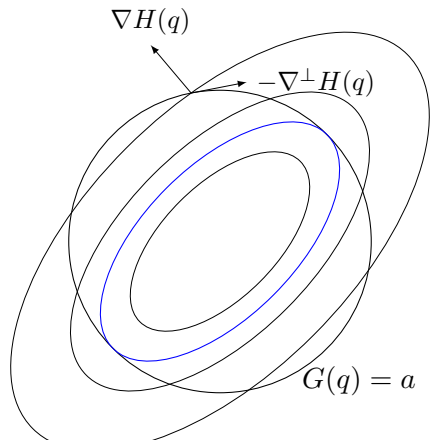
Descenso por gradiente proyectado

$$\dot{q} = -\nabla^\perp H(q) = -\nabla H(q) + \frac{\nabla H(q) \cdot \nabla G(q)}{\nabla G(q) \cdot \nabla G(q)} \nabla G(q)$$

$G(q(t)) = G(q(0))$  y  $H(q(t))$  es decreciente



# Problemas variacionales



# Estados fundamentales

Soluciones  $u(t, x) = e^{i\omega t}\psi(x)$  de  $u_t = i\nabla^2 u + i|u|^2 u$

$$\omega \psi = \nabla^2 \psi + |\psi|^2 \psi$$

$$\begin{cases} \min \int_{\mathbb{R}^d} \left( \frac{1}{2} |\nabla \psi(x)|^2 - \frac{1}{4} |\psi(x)|^4 \right) dx \\ \|\psi\|_{L^2}^2 = a \end{cases}$$

# Estados fundamentales

Soluciones  $u(t, x) = e^{i\omega t}\psi(x)$  de  $u_t = i\nabla^2 u + i|u|^2 u$

$$\omega \psi = \nabla^2 \psi + |\psi|^2 \psi$$

$$\begin{cases} \min \int_{\mathbb{R}^d} \left( \frac{1}{2} |\nabla \psi(x)|^2 - \frac{1}{4} |\psi(x)|^4 \right) dx \\ \|\psi\|_{L^2}^2 = a \end{cases}$$

Descenso por gradiente proyectado

$$u_t = \nabla^2 u + |u|^2 u + a^{-1} \left( \langle \nabla u, \nabla u \rangle - \|u\|_{L^4}^4 \right) u$$

# Inicio de espacio publicitario

M. de Leo, D. R. and C. Sánchez de la Vega, *High-order time-splitting methods for irreversible equations*, IMA Journal of Numerical Analysis **36** (4), 2016.

El método de extrapolación

$$\Phi(h) = \sum_{m=1}^s \gamma_m \Phi_m(h)$$
$$\Phi_m(h) = (\Phi_B(h/m) \circ \Phi_A(h/m))^m$$

con los coeficientes

$$\gamma_1 + \gamma_2 + \cdots + \gamma_s = 1,$$

$$\gamma_1 + 2^{-k} \gamma_2 + \cdots + s^{-k} \gamma_s = 0, \quad k = 1, \dots, q-1$$

Si  $u_0 \in D(L^{q+1})$ , verifica:

$$\max_{0 \leq k \leq n} \|u(kh) - u_k\|_X = O(h^q)$$

Todos los pasos son positivos!

Existen métodos con número de pasos  $q(q+1)$

Es paralelizable

# Métodos simétricos

Métodos de orden  $q = 2n$  con número de pasos  $q(q/2 + 1)$

$$e^{hB}e^{hA} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + 2BA + B^2) + O(h^3)$$

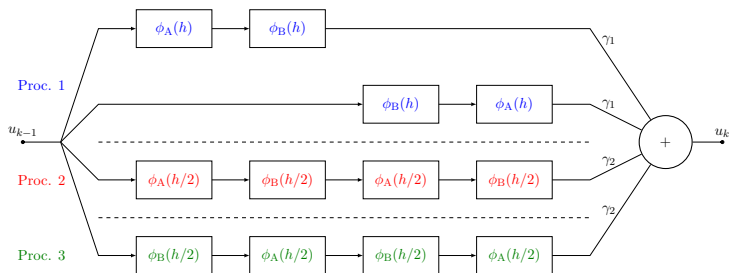
$$e^{hA}e^{hB} = I + h(A + B) + \frac{h^2}{2}(A^2 + 2AB + B^2) + O(h^3)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(e^{hB}e^{hA} + e^{hA}e^{hB}) &= I + h(A + B) \\ &+ \frac{h^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + O(h^3) \end{aligned}$$

# Método simétrico de orden 4

Número de pasos:  $4 * (4/2 + 1) = 12$

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1/2, \gamma_1 + \gamma_2/4 = 0 \mapsto \gamma_1 = -1/6, \gamma_2 = 2/3$$





G. Kuracz, L. R. Kiperman, F. Reyna and P. I. Fierens, *Simulation of pulse propagation in nonlinear optical fibers using GPUs*, IEEE CACIDI 2016 - IEEE Conference on Computer Sciences, Buenos Aires, 2016.

T. Stillfjord, *Adaptive high-order splitting schemes for large-scale differential Riccati equations*, Numerical Algorithms **78** (4), 1129-1151, 2018.

# Existencia de sistemas reacción-difusión

A. Besteiro and D. R.

*Global existence for vector valued fractional reaction-diffusion equations,*

Publicacions matemàtiques, Vol. 65 Núm. 2 (2021), p. 653-680.

<https://ddd.uab.cat/record/248602>

$$\begin{cases} u_t + \sigma(-\nabla^2)^s u = F(t, u) \\ u(0) = u_0. \end{cases}$$

$\sigma > 0$ ,  $0 < s \leq 1$ ,  $u(t) \in C_u(\mathbb{R}^d, Z)$ ,  $Z$  espacio de Banach,

$F$  continua y localmente Lipschitz en  $z$

# Cálculo variacional

Métodos Variacionales en la Segmentación de Imágenes  
PICYDT UNM VII — 2021    Universidad Nacional de Moreno

$I(x, y)$ : imagen

# Cálculo variacional

Métodos Variacionales en la Segmentación de Imágenes

PICYDT UNM VII — 2021 Universidad Nacional de Moreno

$I(x, y)$ : imagen

Funcional

$$V(u) = \int_R \left( \sigma \left| (-\nabla^2)^{s/2} u \right|^2 + F(u, I) \right) dx dy$$

# Cálculo variacional

Métodos Variacionales en la Segmentación de Imágenes  
PICYDT UNM VII — 2021 Universidad Nacional de Moreno

$I(x, y)$ : imagen

Funcional

$$V(u) = \int_R \left( \sigma \left| (-\nabla^2)^{s/2} u \right|^2 + F(u, I) \right) dx dy$$

Descenso gradiente:

$$u_t + \sigma \left( -\nabla^2 \right)^s u = F_u(u, I)$$

# Cálculo variacional: ecuación de Allen–Cahn

Dongsun Lee and Seunggyu Lee, *Image Segmentation Based on Modified Fractional Allen–Cahn Equation, Mathematical Problems in Engineering Volume 2019, Article ID 3980181*

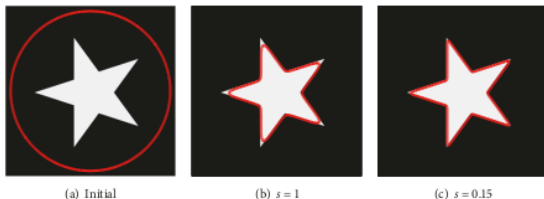


FIGURE 3: (a) Initial condition and segmentation results with (b) classical and (c) fractional Allen–Cahn equations.

# Cálculo variacional: ecuación de Allen–Cahn

Dongsun Lee and Seunggyu Lee, *Image Segmentation Based on Modified Fractional Allen–Cahn Equation, Mathematical Problems in Engineering Volume 2019, Article ID 3980181*

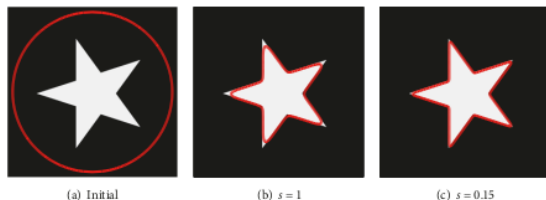


FIGURE 3: (a) Initial condition and segmentation results with (b) classical and (c) fractional Allen–Cahn equations.

$$F(u, I) = K (1 - u^2)^2 + (u - I)^2, \quad u(x, y) \in [-1, 1]$$

# Cálculo variacional: ecuación de Allen–Cahn

Dongsun Lee and Seunggyu Lee, *Image Segmentation Based on Modified Fractional Allen–Cahn Equation*, *Mathematical Problems in Engineering* Volume 2019, Article ID 3980181

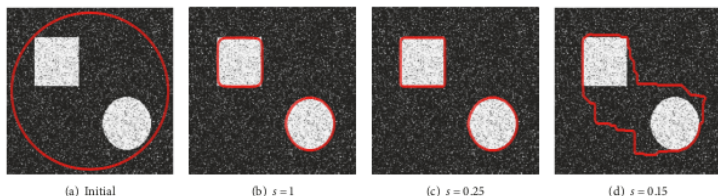


FIGURE 4: (a) Initial condition and (b)–(d) segmentation results with different  $s$  values.

$$F(u) = K(1 - u^2)^2 + (u - I)^2, \quad u(x, y) \in [-1, 1]$$



# Muchas gracias!

# Muchas gracias!

Referencias adicionales:

# Muchas gracias!

Referencias adicionales:

V. I. Lenin, *Un paso adelante, dos pasos atrás*, II Congreso del Partido Obrero Socialdemócrata de Rusia, Bruselas-Londres, 1904.

# Muchas gracias!

Referencias adicionales:

V. I. Lenin, *Un paso adelante, dos pasos atrás*, II Congreso del Partido Obrero Socialdemócrata de Rusia, Bruselas-Londres, 1904.

Cuarteto Leo, *Un paso pa adelante, un paso para atrás*, disco doble, CBS, 1974. La Gaita Picante