

Resum

La cèlebre equació d'Schrödinger és la clau per comprendre la dinàmica de partícules quàntiques i es presenta en una gran varietat de forms. La seua resolució numèrica planteja nombrosos reptes, alguns dels quals són referits en aquest treball.

Possiblement, el problema més important en la mecànica quàntica és l'anomenat oscil·lador harmònic degut a la seua capacitat d'aproximar potencials d'atracció. En el capítol 2, s'introdueix una tècnica de correspondència algebràica i s'aplica per a construir algorismes eficients d'escissió (anomenats *splittings*), basats únicament en transformacions de Fourier ràpides, que resolen potencials quadràtics en qualsevol nombre exacte de dimensions – inclòs l'important cas de les partícules rotatòries així com la situació, considerablement més comuna, de potencials no autònoms després de promitjar a través de desenvolupaments de Magnus. Els resultats es mostren transferibles acuradament a l'equació de Gross-Pitaveskii en el capítol 3. A més, la noció de potencials no lineals modificats s'introdueix i es mostra com computar-los eficientment utilitzant les transformades de Fourier. També es mostra com aplicar *splittings* de coeficients complexos a aquesta equació no lineal i resultats numèrics corroboren les troballes.

En el límit semiclàssic, l'operador evolució es converteix en altament oscil·latori i els mètodes estàndards de splitting pateixen un increment exponencial de complexitat quan s'augmenta l'ordre del mètode. Es troben algorismes amb cost computacional de dependència solament quadràtica respecte l'ordre utilitzant l'algorisme de Zassenhaus. Al contrari que els *splittings* clàssics, es permet l'aparició de commutadors especials en els exponents. La seua construcció implica un ràpid decreixement en magnitud amb el paràmetre semiclàssic dels commutadors i pot ser exponenciat utilitzant unes poques iteracions de Lanczos. Per completar, s'ha revisat i interpretat una tècnica alternativa basada en paquets d'ona de Hagedorn a la llum dels desenvolupaments de Magnus i s'han suggerit millores. En presència de dependències explícites del temps en el Hamiltonià semiclàssic, l'algorisme Zassenhaus requereix un pas d'iniciació especial. Diferenciant els casos de freqüències suaus i ràpides, es mostra com adaptar el mecanisme per a obtindre una descomposició eficientment computable d'un Hamiltonià efectiu que s'ha obtés després del desenvolupament de Magnus, sense haver de resoldre les oscil·lacions prenent un prohibitivament menut pas de temps.

El capítol 5 considera la possibilitat de formular el problema d'autovalors de Schrödinger com un problema de valor inicial després d'aplicar una rotació de Wick al temps imaginari a l'equació de Schrödinger. La naturalesa elíptica de l'operador evolució restringeix els *splittings* estàndards a ordres baixos, $p < 3$, donada la inevitable aparició de passos fraccionals de temps negatius que corresponen a un mal condicionament del problema: la integració cap a darrere en el temps. La inclusió de potencials modificats eleva la barrera de l'ordre a $p < 5$. Ambdues restriccions poden ser sobrepassades mitjançant l'ús de passos fraccionals de temps complexos amb part real positiva i es presenten mètodes optimitzats de 6é ordre per a Hamiltonians quasi-integrables.

Les conclusions i les línies a seguir en futures investigacions són detallades en el capítol 6, amb especial atenció al control quàntic òptim.