

Desempeño de algunos métodos de Runge-Kutta en la aproximación numérica de la ecuación lineal de Schrödinger

P. Castillo^a y A. Reyes^b

^aDepartamento de Ciencias Matemáticas, Universidad de Puerto Rico,
Call Box 9000, Mayagüez, Puerto Rico 00681-9018.

e-mail: paul.castillo@upr.edu,

^bDepartamento de Física, Universidad de Puerto Rico,
Call Box 9000, Mayagüez, Puerto Rico 00681-9018.
e-mail: angel.reyes21@upr.edu.

Received 12 February 2025; accepted 28 March 2025

Se comparan diferentes métodos de Runge-Kutta tradicionales aplicados a la ecuación lineal de Schrödinger. Se estudia la conservación de los invariantes físicos relevantes de esta ecuación haciendo uso de un problema escalar elemental, la hermiticidad del operador hamiltoniano y argumentos básicos de álgebra matricial. Además, se discute la estabilidad numérica, solubilidad y selección del paso en tiempo en estos métodos.

Descriptores: Ecuación de Schrödinger; métodos conservativos; métodos Runge-Kutta; invariantes numéricos.

Different traditional Runge-Kutta methods applied to the linear Schrödinger equation are compared. The conservation of the relevant physical invariants of this equation is studied using an elementary scalar problem, the hermiticity of the Hamiltonian operator and basic arguments of matrix algebra. In addition, numerical stability, solubility and time step selection for these methods are discussed.

Keywords: Schrödinger equation; conservative methods; Runge-Kutta methods; numerical invariants.

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.23.010209>

1. Introducción

El uso de simulaciones numéricas se ha convertido en una práctica común, casi indispensable, en el estudio de problemas físicos complejos cuya solución no puede expresarse en forma cerrada o simplemente porque esta requiere de cálculos complicados para su manipulación. En la actualidad, existe una enorme cantidad de métodos numéricos para aproximar la solución de un problema específico, cada uno con ventajas y desventajas. Desafortunadamente, la falta o poco conocimiento teórico puede provocar un uso deficiente de estas técnicas. El propósito del presente trabajo es mostrar mediante un simple análisis teórico, el cual no requiere más que de conocimientos básicos de álgebra lineal y análisis numérico adquiridos a nivel de licenciatura, algunas de las propiedades de ciertos métodos clásicos de avance en tiempo aplicados a un problema específico pero de gran relevancia en física. Concretamente, nos enfocaremos en algunos métodos de Runge-Kutta (RK), para aproximar la solución de la ecuación lineal de Schrödinger, la cual juega un papel central en mecánica cuántica. En esta ecuación, el estado cuántico de una partícula de masa m se modela mediante una función de onda de valor complejo $\psi(\mathbf{x}, t)$, cuya magnitud al cuadrado representa la densidad de la probabilidad de la presencia de la partícula en la posición \mathbf{x} en el instante t ; y su evolución temporal satisface

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}(\psi), \quad \mathcal{H}(\cdot) := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\cdot) + V(\mathbf{x}, t)(\cdot). \quad (1)$$

La función $V : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ representa un potencial externo al cual está sujeta la partícula y \hbar es la constante de Planck reducida. La energía total del sistema se describe por medio del operador Hamiltoniano $\mathcal{H}(\cdot)$, el primer término se relaciona con la energía cinética mientras que el segundo está vinculado con la energía potencial. Para una introducción al tema sugerimos Griffiths y Schroeter [8] o la extensa obra de Cohen y colaboradores [5]. El problema se completa con condiciones iniciales $\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_0(\mathbf{x})$ y condiciones de borde para dominios acotados, las cuales pueden ser de tipo Dirichlet nulas o periódicas.

La función de onda satisface dos leyes de conservación de gran relevancia de la física, la primera es la probabilidad (2a); la segunda es la energía total (valor esperado del operador Hamiltoniano) (2b), la cual ocurre para potenciales externos independientes del tiempo

$$\mathcal{P}(t) := \int_{\Omega} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}, \quad (2a)$$

$$\mathcal{E}(t) := \int_{\Omega} \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}(\psi(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}. \quad (2b)$$

En lugar de aplicar resultados generales, nuestra discusión se enfocará en el estudio de las propiedades de los métodos de avance en tiempo aplicados específicamente a la ecuación lineal de Schrödinger, basándonos en la conservación de los análogos discretos de los invariantes, la solubilidad y la estabilidad numérica.

Con el propósito de obtener una ecuación diferencial ordinaria (EDO), en la Sec. 2 se describe el proceso clásico de semi discretización para la ecuación de Schrödinger (1), utilizando diferencias finitas como método de discretización espacial. En la Sec. 3 se repasan brevemente los métodos de avance en tiempo de tipo Runge-Kutta para la aproximación numérica de esta EDO y algunas de sus propiedades básicas. El estudio teórico y numérico de las propiedades de conservación de estos métodos se realiza en la Sec. 4; y en la Sec. 5 se discuten algunos aspectos computacionales relacionados con la selección del incremento en tiempo.

2. Semi discretización

Por claridad en la presentación, nos restringimos a problemas unidimensionales. La aproximación numérica se realiza en aritmética de números complejos con doble precisión (15 dígitos de precisión), en un dominio espacial acotado $\Omega = [a, b]$, el cual se discretiza utilizando una división uniforme de N_x segmentos, $x_m = a + m\delta_x$, $m = 0, \dots, N_x$, $\delta_x := (b - a)/N_x$. Se consideran condiciones de borde de tipo Dirichlet nulas, aunque también podríamos considerar condiciones periódicas. En la formulación semi discreta, se asume la variable temporal continua y la espacial discreta. El problema original (1) se transforma en un sistema acoplado de $M = N_x - 1$ ecuaciones diferenciales ordinarias lineales, el cual se escribe de forma compacta como una ecuación diferencial lineal autónoma

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H(t)\Psi, \quad H(t) := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_h + V_h(t), \quad (3)$$

donde la componente m del vector $\Psi \in \mathbb{C}^M$ es la aproximación de $\psi(x_m, t)$, $V_h(t) \in \mathbb{R}^{M \times M}$ es una matriz diagonal, cuyos elementos en la diagonal principal son $V(x_m, t)$; y, $\Delta_h \in \mathbb{R}^{M \times M}$ es el operador discreto que se obtiene al aproximar $\partial^2(\cdot)/\partial x^2$ mediante alguna fórmula de diferenciación. En nuestro caso, consideramos por su sencillez, la fórmula clásica de diferenciación central

$$\frac{\partial^2 \psi(x_m)}{\partial x^2} \approx \delta_h^o(x_m) := \frac{\psi(x_{m-1}) - 2\psi(x_m) + \psi(x_{m+1})}{\delta_x^2}.$$

Asumiendo que $\psi(\cdot)$ es suficientemente suave, en concreto, que al menos la cuarta derivada de su parte real e imaginaria sean continuas, un análisis elemental mediante desarrollos de Taylor muestra que esta fórmula es de segundo orden, es decir, $|\partial^2 \psi(x_m)/\partial x^2 - \delta_h^o(x_m)| \leq C\delta_x^2$, donde C es una constante que solo depende de la función ψ . Para aproximaciones de orden superior a dos, y asumiendo que la solución posee más regularidad, se podrían considerar las presentadas por Lele [12]. Estas fueron utilizadas por uno de los autores en [1, 2] para el diseño de un método conservativo para sistemas de ecuaciones de Schrödinger no lineales en 1D y recientemente en [4] para sistemas de Gross-Pitaevskii en 2D. Además de obtener mayor precisión, estas poseen otras ventajas como la de reducir el error de fase, es decir, reducir la diferencia entre la velocidad de propagación numérica de una

onda y su velocidad real, sin embargo esto requiere otro tipo de análisis el cual no discutiremos en este trabajo.

La formulación semi-discreta (3) es similar para problemas multidimensionales, en donde la discretización del operador laplaciano se obtiene simplemente aplicando la misma fórmula de diferenciación en cada una de las direcciones espaciales. En cualquier caso, la matriz $-\Delta_h$ es simétrica definida positiva, cuando se consideran condiciones de borde de tipo Dirichlet y simétrica positiva no definida para condiciones periódicas. Por lo que $H(t)$ (o simplemente H cuando no hay dependencia temporal) también es simétrica y por lo tanto ortogonalmente diagonalizable, es decir, admite una factorización de la forma

$$H = Q\Lambda Q^T, \quad (4)$$

donde $Q \in \mathbb{R}^{M \times M}$ es una matriz ortogonal y $\Lambda \in \mathbb{R}^{M \times M}$ es una matriz diagonal. Además, si el potencial externo $V(\cdot)$ es una función no negativa todos los valores propios de H son estrictamente positivos. Esta descomposición espectral será de gran utilidad para nuestro análisis.

3. Métodos de Runge-Kutta

Existe una gran variedad de métodos de avance en tiempo desarrollados específicamente para aproximar la solución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (3). Motivados principalmente en obtener mayor eficiencia, sobre todo para problemas en 3D, la tendencia predominante se enfoca en métodos explícitos, los cuales requieren únicamente de la implementación de la acción del operador Hamiltoniano sobre un vector (multiplicación matriz-vector). Por ejemplo, Visscher [16], interpretando el problema original como un sistema lineal acoplado para la parte real e imaginaria del campo $\psi(x, t)$, propone un método en donde, en cada paso de tiempo, primero se aproxima la parte real y luego la imaginaria, ambas de forma explícita. Este método también fue utilizado por Sullivan [13] Cap 6, aunque su aparente motivación fue la de evitar aritmética compleja; y por Dimeo [7] para modelar varios escenarios de la ecuación de Schrödinger con potenciales que dependen del tiempo en problemas unidimensionales. El análisis teórico de esta técnica fue realizado por Day y col. en [6]. En todas estas referencias se utilizó diferencias finitas centrales de segundo orden para la discretización espacial. Recientemente, van Dijk [15] considera la técnica de paso multiple de Askar y Cakmak [3] combinada con diferencias finitas de alto orden en espacio. Desafortunadamente, no todos son capaces de reproducir numéricamente algunas de las propiedades relevantes del problema físico; en particular, no conservan, necesariamente, los invariantes de la ecuación de Schrödinger, o mejor dicho los análogos discretos de (2a)-(2b).

En este estudio nos enfocaremos en algunos métodos de Runge-Kutta (RK), que son frecuentemente tratados en cursos introductorios de análisis numérico a nivel de licenciatura: concretamente en a) el de Euler explícito e implícito, los

cuales denotaremos respectivamente por ERK1 y IRK1; b) ambas versiones del método del Trapecio, ERK2 y IRK2; c) el método clásico ERK4, explícito de orden 4 y d) el método implícito de Hammer & Hollingsworth. Para una introducción al análisis teórico y discusión de varios aspectos computacionales de estos y otro tipo de métodos, se recomienda fuertemente la excelente obra de Hairer y colaboradores [10, 11].

La aplicación de cualquiera de estos métodos al sistema lineal (3) obtenido en la sección anterior, comienza con una discretización en el tiempo. Sea $\tau > 0$ y $\Psi^n \in \mathbb{C}^M$ la aproximación obtenida en el tiempo discreto $t_n = n\tau$. Esencialmente, un método de avance en tiempo de un paso tiene como objetivo calcular Ψ^{n+1} a partir de Ψ^n , para cualquier $n \in \mathbb{N}$. En particular, la estructura general de un método RK de s etapas intermedias, aplicado a la ecuación lineal autónoma $\Psi = A(t)\Psi$ es

$$\begin{aligned} K_1 &= A(t_n + c_1\tau)(\Psi^n + \tau(a_{11}K_1 + \dots a_{1s}K_s)), \\ &\vdots \\ K_s &= A(t_n + c_s\tau)(\Psi^n + \tau(a_{s1}K_1 + \dots a_{ss}K_s)), \\ \Psi^{n+1} &= \Psi^n + \tau(b_1K_1 + \dots b_sK_s). \end{aligned} \quad (5)$$

Los coeficientes a_{ij} , b_j , c_j satisfacen ciertas condiciones para garantizar orden de convergencia óptimo, [10, 11]. Para la Ec. (3) se tiene $A(t) := -(i/\hbar)H(t)$. Si bien es cierto que en la mayoría de nuestros ejemplos los potenciales son estacionarios, lo cual simplifica la implementación, nos parece pertinente presentar la formulación de manera un poco más general, la cual también considera potenciales externos que dependen del tiempo. Se puede mostrar [11] que para cualquier método RK aplicado a un sistema lineal de coeficientes constantes existe una función polinomial o racional, $R(\cdot)$, llamada función de estabilidad (lineal) tal que

$$\Psi^{n+1} = R(\tau A)\Psi^n, \quad \forall n \geq 0. \quad (6)$$

En particular, para cualquier método RK explícito de orden p , con $s = p$, la función de estabilidad es el polinomio de Taylor de grado p de la función exponencial e^z , (Ec. (2.12) p.17 [11]),

$$R(z) = 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \dots + \frac{1}{p!}z^p. \quad (7)$$

Esta función juega un papel central en el análisis y desarrollo de métodos de avance en tiempo para ecuaciones diferenciales ordinarias. Por ejemplo, el concepto de estabilidad absoluta o de método A-estable, definición 3.3 p.42 [11], el cual refiere a emular numéricamente el mismo comportamiento asintótico de aquellas soluciones exactas que decaen a cero cuando t tiende al infinito, se obtiene de (6), imponiendo la condición $|R(z)| \leq 1$. Debido a la conservación de la distribución de probabilidad, es de gran interés determinar aquellos valores de $z \in \mathbb{C}$ que satisfacen, en el mejor de los casos,

TABLA I. Función de estabilidad y orden de convergencia.

Método	$R(z)$	Orden
ERK1	$1 + z$	1
ERK2	$1 + z + \frac{1}{2}z^2$	2
ERK4	$1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{24}z^4$	4
IRK1	$1/(1-z)$	1
IRK2	$(1 + \frac{1}{2}z) / (1 - \frac{1}{2}z)$	2
IRK4	$(1 + \frac{1}{2}z + \frac{1}{12}z^2) / (1 - \frac{1}{2}z + \frac{1}{12}z^2)$	4

$|R(z)| = 1$; o por lo menos la desigualdad. Este conjunto se conoce como dominio de estabilidad absoluta, definición 2.1 p.16 [11]. En la Tabla I, muestra dicha función de estabilidad y el orden de convergencia para cada uno de los métodos particulares anteriormente citados, para más detalles consultar IV.3 p.40 [11].

4. Conservación de invariantes

4.1. Problema modelo

Con el propósito de ilustrar de manera clara y sencilla la conservación de invariantes a nivel discreto, comenzaremos analizando un problema escalar lineal, matemáticamente análogo al problema (3). Esto facilitará nuestra discusión sobre la conservación de la probabilidad (2a). Para ello consideremos el siguiente problema de Cauchy, $\psi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$, tal que

$$\frac{d\psi}{dt} = -i\lambda\psi, \quad \psi(0) = \psi_0, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \quad (8)$$

cuya solución exacta es la función $\psi(t) = e^{-i\lambda t}\psi_0$, la cual satisface la siguiente propiedad de conservación, para cualquier $t > 0$ se cumple $|\psi(t)| = |\psi_0|$. Geométricamente, la solución permanece en el círculo de radio $r_0 := |\psi_0|$ y centro en el origen del plano complejo \mathbb{C} . Naturalmente deseamos que un método numérico reproduzca esta propiedad. De acuerdo a la definición de la función de estabilidad (6), la conservación del invariante equivale a probar la relación $|R(-i\lambda\tau)| = 1$ para cualquier valor de $\tau > 0$ y de $\lambda \in \mathbb{R}$. En el caso de los métodos RK implícitos en la Tabla I un simple cálculo muestra que

$$z := \lambda\tau, \quad |R(-iz)| = \begin{cases} 1/\sqrt{1+z^2} & \text{IRK1}, \\ 1 & \text{IRK2, IRK4}. \end{cases} \quad (9)$$

Podemos concluir inmediatamente que los métodos del Trapecio implícito (IRK2) y el de Hammer & Hollingsworth (IRK4) conservan el invariante; mientras que el método Euler implícito (IRK1), a pesar de ser un método absolutamente estable, no lo preserva, por el contrario este decae en magnitud ya que para cualquier $\tau > 0$, $|R(-i\lambda\tau)| < 1$.

Por otro lado, de acuerdo a (7), la función $|R(-iz)|^2$ es un polinomio de grado $2p$ para cualquier método RK explícito, con $s = p$; por lo que estos no pueden ser conservativos. En particular, para los métodos ERK1 y ERK2 se tiene

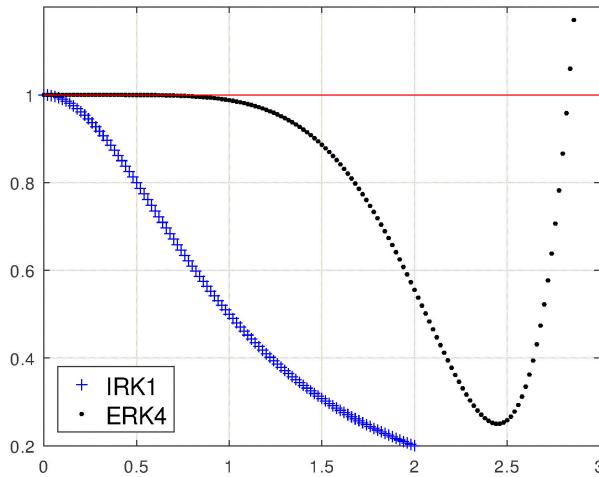


FIGURA 1. Comportamiento de $|R(-iz)|^2$ para IRK1 y ERK4.

$$z := \lambda\tau, \quad |R(-iz)|^2 = \begin{cases} 1 + z^2 & \text{ERK1}, \\ 1 + \frac{1}{4}z^4 & \text{ERK2}. \end{cases} \quad (10)$$

Claramente, ambas funciones son estrictamente mayores a 1 para cualquier valor de τ y λ , por lo que la magnitud del invariante aumenta, en menor cantidad para ERK2 que para ERK1 si se escoge $\tau\lambda \ll 1$. En conclusión, estos métodos son incondicional y absolutamente inestables por lo que no son apropiados para el problema modelo (8). Debemos resaltar que no se trata de una falta de convergencia, el análisis de error correspondiente revela que para el problema de Cauchy (lineal o no lineal) $\dot{y} = f(t, y)$, una condición suficiente para convergencia es que la función $f(t, y)$ sea Lipschitz en la segunda variable, la cual se cumple evidentemente en nuestro problema modelo.

El comportamiento del polinomio correspondiente al método ERK4 es más interesante y se muestra en la Fig. 1. A pesar de no conservar el invariante, nótese que para $|\lambda\tau| \in [0, 1]$ este polinomio difiere de 1 por muy poco, lo cual sugiere que escogiendo $|\lambda\tau|$ en ese rango, se observaría muy poca variación en la evolución del invariante, dando una falsa impresión de conservación en simulaciones a corto plazo. En la práctica, esta condición suele ser muy restrictiva. Para tener una mejor idea, cuando se utiliza la fórmula de diferenciación central en la ecuación de Schrödinger unidimensional, λ recorre el espectro de la matriz $(1/\hbar)H$ y su valor máximo es de orden δ_x^{-2} . Por otro lado, obsérvese que en el intervalo $[0, 1]$, el módulo de la función de estabilidad del método IRK1 es mucho menor que el de ERK4, lo cual favorece el uso de este último por presentar un menor decaimiento en el invariante.

4.2. Conservación de probabilidad

El análogo discreto del invariante de probabilidad se define formalmente por

$$\mathcal{P}_h(t_n) := \|\Psi^n\|_h^2, \quad (11)$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle_h$ el producto interior en el espacio \mathbb{C}^M y su respectiva norma $\|\cdot\|_h$ están definidos para cualquier $u, v \in \mathbb{C}^M$, por $\langle u, v \rangle_h := \delta_x \sum_{j=1}^M u_j \bar{v}_j$ y $\|u\|_h^2 := \langle u, u \rangle_h$. El factor δ_x se utiliza para que estas cantidades se ajusten debidamente al valor de la integral, además es la norma adecuada para analizar la convergencia para discretizaciones espaciales en diferencias finitas. Primero, nótese que el invariante discreto de probabilidad $\mathcal{P}_h(\cdot)$ es precisamente el invariante natural del sistema (3), el cual se obtiene de

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\Psi\|_h^2 = \text{REL} \left(\left\langle \frac{d}{dt} \Psi, \Psi \right\rangle_h \right), \quad (12a)$$

$$= \text{REL} \left(\left\langle -\frac{i}{\hbar} H \Psi, \Psi \right\rangle_h \right) = 0, \quad (12b)$$

donde la última igualdad se justifica notando que H es una matriz hermítica. Por lo tanto para cualquier $t > 0$, $\|\Psi(t)\|_h^2 = \|\Psi(0)\|_h^2 = \mathcal{P}_h(0)$. Este resultado es válido aún para potenciales de valor real que dependen del tiempo: el Hamiltoniano discreto H sigue siendo hermítico. La conservación de este invariante indica que la solución de (3) pertenece a la esfera de radio $r_o = \sqrt{\mathcal{P}_h(0)}$ en \mathbb{C}^M , de forma similar a lo que ocurre en el problema escalar. Como veremos a continuación, podemos aplicar el análisis de la sección anterior para determinar cuáles métodos RK preservan la probabilidad.

Asumiendo que el potencial externo es independiente del tiempo y considerando el cambio de variable $Y = Q^T \Psi$ donde Q es la matriz ortogonal de la descomposición espectral de H , (4), se tiene $\|\Psi^n\|_h = \|Y^n\|_h$ para cualquier $n \in \mathbb{N}$; además el problema discreto (3) se transforma en un sistema completamente desacoplado, por lo tanto, más sencillo para el análisis. El método RK se reduce a

$$Y^{n+1} = R \left(-i \frac{\tau}{\hbar} \Lambda \right) Y^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (13)$$

Siendo $R(-i(\tau/\hbar)\Lambda)$ una matriz diagonal, cada componente de (13) es la aplicación del método RK a una ecuación similar al problema escalar modelo (8). Por lo que la conservación del invariante discreto \mathcal{P}_h se reduce al estudio de comportamiento de la función $|R(-iz)|$, $z := \tau\lambda$, donde λ pertenece al espectro de $(1/\hbar)H$. Además, puesto que H es simétrica, $\lambda \in \mathbb{R}$, el método conservará \mathcal{P}_h siempre y cuando dicha función sea igual a 1 para cualquier valor de $\lambda \in \mathbb{R}$. De acuerdo al estudio realizado en la sección anterior, podemos concluir que ninguno de los métodos explícitos RK preserva el invariante de probabilidad; y al igual que en el caso escalar, los únicos métodos implícitos que preservan la probabilidad son IRK2 e IRK4.

Ejemplo 1. Consideramos el problema de un electrón, de masa m_e , atrapado en un pozo $\Omega = [0, L]$ de potencial infinito. Las condiciones iniciales son los estados estacionarios $\psi_n(x) := \sqrt{2/L} \sin(k_n x)$, $k_n = n\pi/L$, con $n = 1, 2, 4$. Este problema tiene solución exacta $\psi(x, t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$, donde $E_n = k_n^2 \hbar^2 / (2m_e)$ es el nivel de energía.

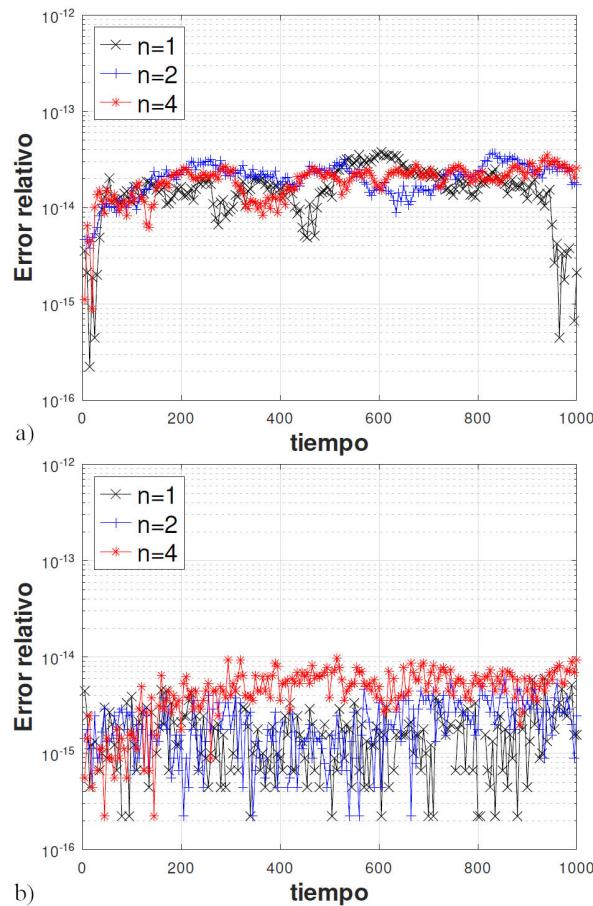


FIGURE 2. Evolución del error relativo en la probabilidad para los métodos IRK2 (arriba), IRK4 (abajo) en el Ejemplo 1. Los parámetros de discretización utilizados fueron $L = 100$, $N_x = 1000$ ($\delta_x = 0.1$), $N_t = 10^6$ ($\tau = 0.001$) para IRK2 y $N_t = 10^5$ ($\tau = 0.01$) para IRK4.

En la Fig. 2 se muestra la evolución del error relativo de $\mathcal{P}_h(\cdot)$ con respecto a su aproximación inicial $\mathcal{P}_h(0)$. Claramente, la escala de la gráfica comprueba la conservación del invariante discreto en todos los ejemplos y para ambos métodos IRK2 e IRK4.

En la Fig. 3 se ilustra la evolución del error relativo (sin valor absoluto) de la probabilidad para el problema anterior, con $n = 4$ y distintos valores de τ , para el método ERK4. En primer lugar, el valor negativo muestra, como previsto por el comportamiento de la función de estabilidad de este método, el decaimiento del invariante para cualquier valor de τ . Por otro lado, se observa la degradación de la aparente conservación para simulaciones a largo plazo. Debido a la restricción severa impuesta por la estabilidad del método, el cual requiere escoger $\tau \lambda_{\max} \approx 1$, ($\tau \approx \delta_x^{-2}$) el número de puntos utilizados en esta simulación fue menor $N_x = 200$, $\delta_x = 0.5$. Nótese que para la malla utilizada en los métodos implícitos donde $\delta_x = 0.001$, la estabilidad del método ERK4 requeriría escoger $\tau \approx 10^{-5}$ para un total de 10^8 pasos en tiempo, lo cual ilustra una desventaja en el uso de un método explícito para simulaciones en largos períodos de tiempo.

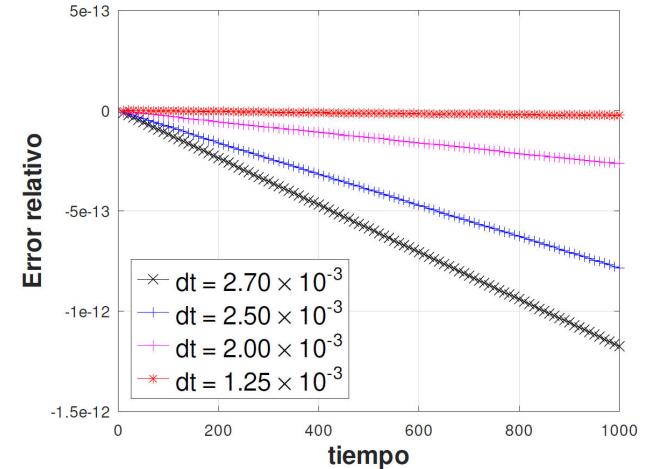


FIGURA 3. Evolución del error relativo $\mathcal{P}_h(t)/\mathcal{P}_h(0) - 1$ para el método ERK4 en el Ejemplo 1 con $n = 4$ y diferentes valores del incremento en tiempo.

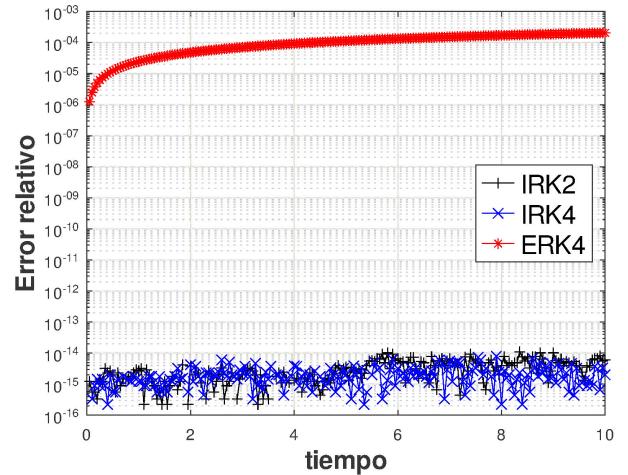


FIGURA 4. Evolución del error relativo de la probabilidad para el problema de degradación, Ejemplo 2.

Ejemplo 2. Estudiamos la conservación para un modelo que simula un sistema cuántico con degradación. Inicialmente la partícula se encuentra confinada en una región, pero debido al efecto túnel esta se escapa a través de la barrera de potencial. La solución analítica de este problema para diferentes escenarios fue estudiada por van Dijk y Nogami en Ref. [14]. Los parámetros de este problema fueron tomados de [15] donde $\hbar = 2m_e = 1$; las condiciones iniciales en el dominio $\Omega = [0, 800]$ se definen por

$$\psi_o(x) = \begin{cases} \sqrt{2} \sin(\pi x), & x \in [0, 1], \\ 0 & 1 \leq x. \end{cases} \quad (14)$$

La barrera de potencial se modela mediante la siguiente función

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ \frac{3}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-(x-1)^2/\sigma^2}, & 0 \leq x. \end{cases} \quad (15)$$

En la Fig. 4 se muestra la evolución del error relativo en la probabilidad. Los parámetros de discretización fueron $N_x =$

8000, $\delta_x = 0.1$, esto permite tener cerca de 20 puntos dentro una barrera de potencial donde $\sigma = 0.1$. Para satisfacer el criterio de estabilidad del método ERK4, se consideró $N_t = 10000$ con $\tau = 1.0 \times 10^{-3}$; lo cual asegura $\tau\lambda_{\max} \approx 0.402 \leq 1$. Nótese que a pesar de satisfacer el criterio de estabilidad se observa una pobre conservación del invariante en el caso del método explícito ERK4. Cabe mencionar que debido a la poca regularidad de las condiciones iniciales, este problema es mucho más difícil de aproximar. En este caso se debe considerar otro tipo de discretizaciones espaciales, que no estamos considerando, como por ejemplo volumen/elemento finito, el cual permite hacer adaptatividad en espacio.

4.3. Potenciales que dependen del tiempo

El análisis sobre la conservación realizado en la sección anterior asume que la matriz H es constante, por lo que no aplica en el caso de potenciales que dependen del tiempo. Sin embargo, podemos preservar el invariante de probabilidad, considerando el método del punto medio, el cual también es un método RK de orden 2. Sea $H_{n+1/2} := H(t_n + \tau/2)$, un paso en tiempo de este método se escribe

$$\Psi^{n+1} = \Psi^n - i \frac{\tau}{2\hbar} H_{n+1/2} (\Psi^{n+1} + \Psi^n). \quad (16)$$

Nótese que este método coincide con el método IRK2 para potenciales que no dependen del tiempo; de ahí la posible confusión en el uso correcto de sus nombres. La iteración de este método se escribe

$$\Psi^{n+1} = \Psi^n - i \frac{\tau}{2\hbar} (H_{n+1} \Psi^{n+1} + H_n \Psi^n). \quad (17)$$

La conservación se obtiene considerando la parte real del producto interior en (16) con el vector $\Psi^{n+1} + \Psi^n$ y teniendo en cuenta que $H(\cdot)$ es hermítico para cualquier $t > 0$.

Ejemplo 3. Con el fin de ilustrar la validez de la propiedad de conservación de la probabilidad para potenciales que depende del tiempo, simulamos la transición de estado de un electrón que se encuentra inicialmente en su estado fundamental de energía E_1 y pasa a uno con energía E_2 . La partícula se encuentra confinada inicialmente en el dominio $[-L/2, L/2]$ y luego se aplica una perturbación del Hamiltoniano de la forma

$$V(x, t) := q_e E x \sin\left(\frac{2\pi}{T_{n \rightarrow m}} t\right), \quad (18)$$

donde $T_{n \rightarrow m} := (4L^2 m_e) / ((m^2 - n^2) \pi \hbar)$ es el período de la frecuencia exacta de resonancia para que el sistema de energía inicial E_n pase a uno de energía E_m . Este potencial representa un campo eléctrico que oscila en el tiempo alrededor de $E = 100$ GV/m. Se utilizó el pm como unidad espacial y as para el tiempo. La Fig. 5 muestra la conservación de la probabilidad para el método del punto medio, en precisión de máquina, pero no para el método IRK2. Nótese que para el Hamiltoniano inicial $\lambda_{\max} \approx 5.788 \times 10^3$; por lo tanto para

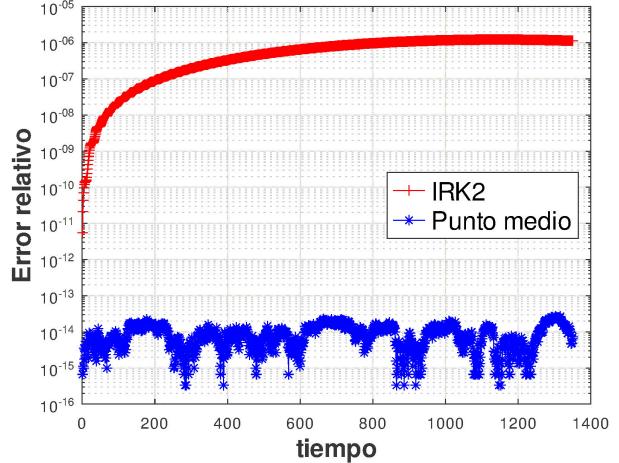


FIGURA 5. Evolución del error relativo de la probabilidad para los métodos IRK2 y punto medio, en el Ejemplo 3. con una discretización donde $L = 100$, $N_x = 500$, $\delta_x = 0.02$ y $N_t = 135000$, $\tau = 0.01$.

TABLA II. Valor exacto y aproximado de E_n , $n = 1, 2$ en eV.

n	exacto	aproximado
1	3.760302e+01	3.760289e+01
2	1.504121e+02	1.504124e+02

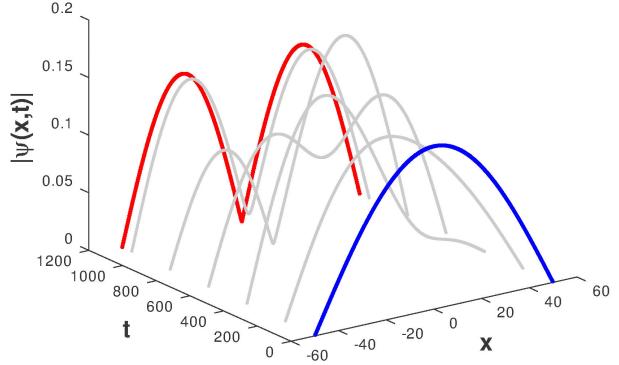


FIGURA 6. Algunas instancias de la evolución de $|\psi(x, t)|$ en el Ejemplo 3. En azul estado fundamental de energía E_1 , en rojo estado de energía E_2 .

para satisfacer el criterio de estabilidad se tendría que escoger $\tau \leq 1.73 \times 10^{-4}$, lo cual muestra que el uso del método ERK4 no es apropiado en este caso.

En la Tabla II se muestra el valor de ambas energías. El aproximado de E_2 reportado corresponde al del instante discreto t_n donde la diferencia con su valor exacto es mínimo. En la Fig. 6 se muestra la evolución de $|\psi(x, t)|$ para algunos instantes discretos. El estado inicial de energía E_1 se muestra en azul mientras que en rojo el del estado donde se alcanza aproximadamente la energía E_2 en $t_n = 1146$ as. Como esperado, la forma de esta última función muestra un comportamiento similar al del estado de energía E_2 .

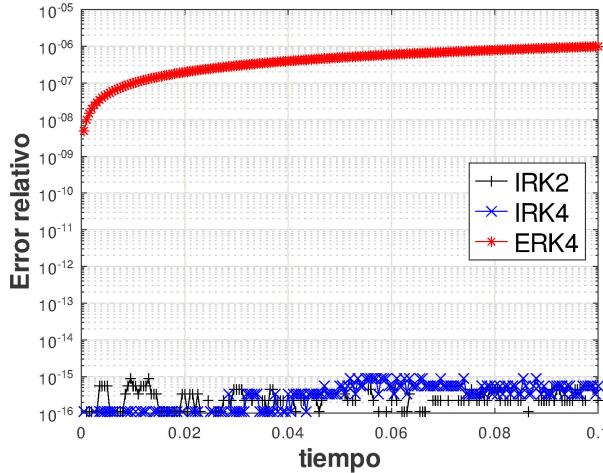


FIGURA 7. Evolución del error relativo de la energía para el problema del Ejemplo 4.

4.4. Conservación de energía

Para potenciales que no dependen del tiempo, podemos considerar el análogo discreto del valor esperado del operador Hamiltoniano (2b), el cual se define como

$$\mathcal{E}_h(t_n) := \langle H\Psi^n, \Psi^n \rangle_h. \quad (19)$$

El análisis sobre las condiciones que deben satisfacer los coeficientes de un método implícito RK de alto orden para garantizar la conservación de este invariante requiere de un conocimiento más profundo y técnico de estos métodos. La presentación de esta teoría está fuera de nuestros propósitos, el interesado podría consultar [9]. Sin embargo, para el método IRK2/método del punto medio se puede elaborar un análisis elemental, simplemente, considerando en (16) la parte imaginaria del producto interior con el vector $\Psi^{n+1} - \Psi^n$ y nuevamente la hermiticidad de H .

Ejemplo 4. Para ilustrar el comportamiento de la evolución de la energía para los métodos IRK2, IRK4 y ERK4 consideramos el problema de un electrón que atraviesa una barrera de potencial. Las condiciones iniciales y el potencial están dados por

$$\psi_o(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{i2\pi x/\lambda} e^{-x^2/(2\sigma^2)}, \quad (20a)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 20, \\ V_o & 20 \leq x, \end{cases} \quad (20b)$$

donde $\lambda = \sigma = 2\text{nm}$. En la Fig. 7 se muestra la evolución del error relativo para una barrera de potencial 0.4eV. Se consideró un dominio espacial suficientemente grande $\Omega = [-100, 100]$ (unidad de longitud nm) para evitar el efecto de contaminación debido a las condiciones de borde nulas. El valor del incremento en tiempo fue $\tau = 10^{-4}$ (unidad de tiempo ps), el cual satisface el criterio de estabilidad del método ERK4 para $N_x = 1000$. La escala de la figura

muestra claramente la conservación de la energía para ambos métodos implícitos, por el contrario el método explícito ERK4 no posee dicha propiedad.

5. Avance en tiempo

5.1. Solubilidad

En cada paso de tiempo de un método implícito se plantea un problema lineal o no lineal dependiendo de la naturaleza de la ecuación diferencial, pero que además depende de τ . Por lo tanto se debe justificar de manera teórica el rango de valores de τ que garanticen la existencia y unicidad de la solución de dicho problema. Para los métodos implícitos en consideración podemos hacer un breve análisis destacando una vez más la hermiticidad del operador discreto H y recurriendo nuevamente a la función de estabilidad, la cual de acuerdo a la Tabla I es una función racional $R(\cdot) := A(\cdot)/B(\cdot)$ donde $A(\cdot)$ y $B(\cdot)$ son polinomios. Por lo tanto la iteración (6) se reescribe como un sistema lineal de la forma

$$B\left(-i\frac{\tau}{\hbar}H\right)\Psi^{n+1} = A\left(-i\frac{\tau}{\hbar}H\right)\Psi^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (21)$$

Usando la descomposición espectral de H , (4) se tiene $B(-i(\tau/\hbar)H) = QB(-i(\tau/\hbar)\Lambda)Q^T$, por lo que la no singularidad de esta matriz se deduce estudiando las raíces del polinomio $B(\cdot)$. Para los métodos IRK1 e IRK2, estas son reales. Como el espectro de H está contenido en \mathbb{R} por ser esta matriz hermítica, entonces para cualquier valor propio λ de $(1/\hbar)H$ se tiene $B(-i\tau\lambda) \neq 0$. Para el método IRK4, observe que las raíces de $B(\cdot)$ son $3 \pm i\sqrt{3}$ por lo que para cualquier valor propio λ de $(1/\hbar)H$ también se cumple $B(-i\tau\lambda) \neq 0$. Por lo tanto, en cada paso de tiempo el sistema es soluble para cualquier incremento en tiempo τ . Este resultado no contradice el de los teoremas 7.2 p.206 [10] o 14.2 p.216 [11], donde se imponen restricciones sobre τ para garantizar solubilidad en un contexto más general. Por otro lado, el análisis se extiende naturalmente a cualquier discretización que preserve la hermiticidad de H , lo cual garantiza que su espectro sea real; y además también aplica al caso multidimensional.

5.2. Paso en tiempo

La selección de τ en el método ERK4, al igual que en otros métodos explícitos, se ve seriamente limitada por una condición de estabilidad absoluta, la cual se expresa como una desigualdad de la forma $\tau\lambda_{\max} \leq C_{\text{CFL}}$, donde λ_{\max} es el valor propio de mayor magnitud de la matriz $(1/\hbar)H$ y C_{CFL} es la constante de Courant-Friedrichs-Lax, que no depende de ningún parámetro de discretización. Desafortunadamente λ_{\max} es de orden δ_x^{-2} . Por el contrario, en los métodos implícitos τ está subordinada mayormente a un criterio de precisión y en lograr capturar las fluctuaciones de aquellas soluciones altamente oscilatorias en tiempo, pero no por una condición de estabilidad.

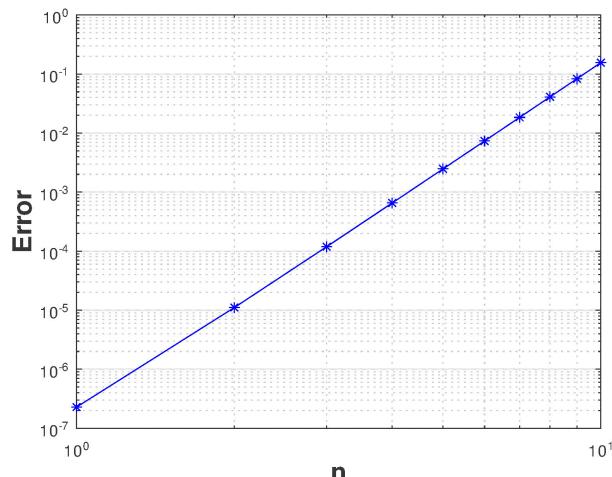


FIGURA 8. Error de la aproximación en $T = 100$, $n = 1, \dots, 10$, en escala logarítmica para el Ejemplo 5. Los parámetros de discretización son $N_x = 8000$ y $\tau = 0.01$.

Ejemplo 5. Evaluamos el error en el tiempo final $T = 100$ para el método IRK2 aplicado al problema del Ejemplo 1, utilizando como condiciones iniciales los estados estacionarios para $n = 1, \dots, 10$ en el dominio $[0, 100]$. El análisis de convergencia de este método revela que existen constantes C_1 y C_2 que dependen de $\partial^4\psi/\partial x^4$ y $\partial^3\psi/\partial t^3$, respectivamente, tales que para $\tau \sim \delta_x$, el error $e(T)$ en el tiempo final T , es proporcional a $(C_1 + C_2)\tau^2$. Para la solución exacta de este problema, las constantes C_1 y C_2 son de orden n^4 y n^6 , respectivamente; por lo que $e(T)$ se comporta como $n^6\tau^2$. Para un incremento en tiempo fijo, la precisión se verá seriamente afectada a medida que n aumenta; es decir, la aproximación de la solución para altos niveles de energía E_n requiere valores de τ bastante pequeños, no por un problema de estabilidad numérica sino por una cuestión de precisión. En la Fig. 8 se muestra el error de la aproximación

en el tiempo $T = 100$; claramente se observa la dependencia lineal (en escala logarítmica) con una pendiente de 6 lo cual concuerda de forma exacta con nuestro análisis.

6. Conclusiones

El método ERK4 se beneficia de una región de estabilidad muy particular la cual justifica su gran popularidad. Para simulaciones en cortos períodos de tiempo y soluciones que poseen bastante regularidad, la degradación en la conservación de los invariantes físicos podría considerarse hasta cierto punto aceptable. Sin embargo, su desempeño se ve limitado para simulaciones a largo plazo y discretizaciones muy finas las cuales imponen una severa restricción en la selección de τ . Por el contrario, los métodos implícitos del trapecio, punto medio o el de Hammer & Hollinsworth reproducen numéricamente la conservación de los invariantes discretos en precisión de máquina. Mediante un simple análisis, se mostró que, en cada paso de avance en tiempo, la solubilidad de la iteración de estos métodos, aplicados a la ecuación lineal de Schrödinger, está garantizada para cualquier valor de $\tau > 0$. Su selección está supeditada más bien a un criterio de precisión, pero no por una restricción debido a estabilidad. Estos métodos son incondicional y absolutamente estables.

Para muchos, el mayor inconveniente estriba en tener que resolver, en cada paso de tiempo, un sistema lineal el cual podría ser costoso, en particular para problemas en 3D. Sin embargo, existen técnicas iterativas eficientes las cuales pueden ser utilizadas. En el caso de problemas unidimensionales, el costo computacional de resolución mediante eliminación de Gauss (método de Thomas) es similar al de la operación matriz-vector por lo que no debería ser un factor determinante en el uso de un método implícito. Desde un punto de vista personal, preferimos aquellos métodos que emulen las propiedades físicas.

-
1. A. Aguilera, P. Castillo and S. Gómez, Structure preserving-Field directional splitting difference methods for nonlinear Schrödinger systems. *Applied Mathematics Letters*, **119** (2021) 107211, <https://doi.org/10.1016/j.aml.2021.107211>
 2. A. Aguilera, P. Castillo and S. Gómez. Método conservativo de diferencias finitas de alto orden para una clase de sistemas de Schrödinger no lineales, *Rev. Mex. Fis. E*, **19** (2022) 1, <https://doi.org/10.31349/RevMexFisE.19.010205>
 3. A. Askar and A.S. Cakmak, Explicit integration method for the time-dependent Schrödinger equation for collision problems. *The Journal of Chemical Physics*, **68** (1978) 2794, <https://doi.org/10.1063/1.436072>
 4. P. Castillo, J. Bermúdez and A. Aguilera, A conservative splitting high-order finite difference method for coupled Gross-Pitaevskii equations in 2D, *The European Journal Physi-*
cal Plus, **138** (2023) 789, <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-023-04402-6>
 5. N. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Lalöe, *Quantum Mechanics*, 2n Ed., Vol I-III, 2020 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany.
 6. W. Dai, G. Li, R. Nassar, and S. Su, On the stability of the FDTD method for solving a time-dependent Schrödinger equation. *Numer. Methods Partial Differential Eq.*, **21** (2005) 1140, <https://doi.org/10.1002/num.20082>
 7. R.M. Dimeo, Wave packet scattering from time-varying potential barriers in one dimension. *American Journal of Physics*, **82** (2014) 142, <https://doi.org/10.1119/1.4833557>
 8. D.J. Griffiths and D.F. Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics*. Third Ed. Cambridge University Press, (2018). <https://doi.org/10.1017/9781316995433>

9. E. Hairer, Ch. Lubich and G. Wanner, Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Second Ed. Springer Berlin, Heidelberg, (2006), <https://doi.org/10.1007/978-3-662-05018-7>
10. E. Hairer, S.P. Nørsett and G. Wanner, Solving ordinary differential equations I: Nonstiff problems. Berlin, New York: Springer-Verlag, (1993), <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-78862-1>
11. E. Hairer and G. Wanner, Solving ordinary differential equations II: Stiff and differential-algebraic problems (2nd ed.). Berlin, New York: Springer-Verlag, 1996. <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-05221-7>
12. S.K. Lele, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.*, **103** (1992) 16, [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-R](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-R)
13. D.M. Sullivan, Electromagnetic simulations using the FDTD method (2nd Ed.). IEEE press, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2013. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/9781118646700>
14. W. van Dijk and Y. Nogami, Analytical approach to the wave function of a decaying quantum system. *Physical Review C*, **65** (2002) 024608, <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.65.024608>
15. W. van Dijk, On numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation, *American Journal of Physics*, **91** (2023) 826, <https://doi.org/10.1119/5.0159866>
16. P.B. Visscher, A fast explicit algorithm for the time dependent Schrödinger equation. *Computer in Physics*, **5** (1991) 596, <https://doi.org/10.1063/1.168415>