

Método de elemento finito discontinuo Padé-LDG para la ecuación de Schrödinger

P. Castillo

*Departamento de Ciencias Matemáticas, Universidad de Puerto Rico, Call Box 9000, Mayagüez, Puerto Rico 00681-9018.
e-mail: paul.castillo@upr.edu*

Received 4 September 2025; accepted 13 October 2025

Se describe un método de alta precisión numérica para la aproximación de la solución de la ecuación de Schrödinger con potenciales independientes del tiempo. El esquema combina el método de elemento finito discontinuo "Local Discontinuous Galerkin" para la discretización espacial y aproximaciones racionales $[m/m]$ -Padé para el avance en tiempo. Se analiza la conservación de los análogos discretos de la probabilidad y energía. Los experimentos numéricos validan la conservación de los invariantes y además muestran que para problemas suficientemente regulares el método converge con orden $\tau^{2m} + h^{p+1}$, donde h y τ son los parámetros de discretización en espacio y tiempo, respectivamente; y p es el grado de los polinomios en la aproximación espacial.

Descriptor: Ecuación de Schrödinger; métodos de elemento finito discontinuo; método LDG; aproximaciones de Padé; métodos conservativos.

A highly accurate numerical method is described for the approximation of the solution of the Schrödinger equation with time-independent potentials. The scheme combines the Local Discontinuous Galerkin finite element method for spatial discretization and rational $[m/m]$ -Padé approximations as time advancing scheme. The conservation of the discrete analogue of the probability and energy is analyzed. Numerical experiments validate the conservation of the invariants and also show that for sufficiently regular problems the method converges with order $\tau^{2m} + h^{p+1}$, where h and τ are the discretization parameters in space and time, respectively; and p is the polynomial degree of the spatial approximation.

Keywords: Schrödinger equation; discontinuous finite element methods; LDG method; Padé approximations; conservative methods.

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.72.020701>

1. Introducción

Debido al papel trascendental que juega la ecuación de Schrödinger en la mecánica cuántica, el desarrollo de técnicas para el cálculo de su solución ha sido de gran interés. En el caso de potenciales que no dependen del tiempo, el procedimiento típico se basa en el método de separación de variables. La solución se expresa como una serie cuyos términos se escriben en función de a) los estados estacionarios los cuales dependen de los auto-vectores y auto-valores del operador Hamiltoniano; y b) los coeficientes de la expansión de las condiciones iniciales con respecto a estos estados, ver por ejemplo Cap 2, [13].

Desafortunadamente, el cálculo de estas funciones y energías características del sistema no es trivial para potenciales y dominios arbitrarios. Esto ha motivado el desarrollo de una amplia variedad de métodos numéricos los cuales combinan distintas técnicas de discretización en espacio y en tiempo. Por su fácil implementación, el método de diferencias finitas ha sido el preferido para la discretización de los operadores espaciales. Sin embargo, esta técnica presenta ciertas limitaciones: las mallas deben ser uniformes en cada una de las direcciones espaciales, lo que no permite el uso de técnicas adaptativas en espacio; y por otro lado, para obtener alta precisión se requiere de fórmulas de diferenciación las cuales de no tratarse con extremo cuidado en los bordes del

dominio pueden ocasionar una pérdida en el orden de convergencia. Por lo general estas asumen nodos fantasmas fuera del dominio.

En virtud de estas restricciones, preferimos una discretización espacial de elemento finito la cual posee mayor versatilidad y flexibilidad. Específicamente, consideramos el método "Local Discontinuous Galerkin" (LDG por sus siglas en inglés), originalmente diseñado por Cockburn y Shu [11] para problemas transitorios de difusión y convección no lineal. Este método se caracteriza por no imponer continuidad entre celdas, por lo que su formulación variacional puede emplearse de manera natural en mallas más generales, concretamente aquellas en 2D y 3D que contienen nodos colgantes. Además permite aproximaciones de orden arbitrario en cada celda, lo que resulta apropiado para esquemas adaptativos en espacio y en el grado de aproximación.

La aplicación del método LDG a la ecuación de Schrödinger se ha enfocado principalmente en aquellas con potenciales no lineales. El primer trabajo se remonta a Xu y Shu [23] donde los autores presentan el primer análisis de convergencia para un potencial cúbico. Estimados de convergencia óptima fueron obtenidos más tarde por Hong, Li y Liu [15]. Métodos LDG superconvergentes y Galerkin discontinuos híbridos han sido recientemente propuestos por Castillo y Gómez [7]. El método también ha sido analizado para la ecuación de Schrödinger con operadores diferenciales

fraccionarios y potenciales no lineales en la Ref. [5]; y en la Ref. [4] para el sistema fraccionario de Klein-Gordon-Schrödinger con interacción generalizada de Yukawa. La conservación de la probabilidad y de la energía, ha sido ampliamente estudiada. Utilizando una variante del método de Crank-Nicolson, en la Ref. [6] se demostró la conservación de estos invariantes para la ecuación de Schrödinger con potenciales no lineales arbitrarios; mientras que en la Ref. [8] se propuso un esquema en tiempo que conserva ambos invariantes en sistemas de Schrödinger fuertemente acoplados por un potencial no lineal.

A diferencia de nuestros trabajos previos, donde utilizamos métodos de composición para obtener mayor precisión en tiempo manteniendo la conservación de ambos invariantes, aquí consideramos un esquema de avance en tiempo más sencillo, el cual se deriva de la aproximación de la función exponencial mediante funciones racionales, conocida como aproximación $[n/m]$ -Padé o simplemente Padé. Esta técnica ha sido extensamente estudiada y aplicada en la aproximación numérica de ecuaciones diferenciales lineales ya sean ordinarias o parciales, ver por ejemplo los trabajos pioneros de Varga [22], Birkhoff y Varga [1], y Ehle [12]. En el contexto específico de la ecuación de Schrödinger, fue considerada por primera vez por Puzynin, Selin y Vinitsky [16] en combinación con B-splines cúbicas para la discretización espacial. En la Ref. [21], van Dijk y Toyama presentaron una generalización considerando diferencias finitas de alto orden para los operadores espaciales y aproximaciones $[n/m]$ -Padé, con n y m arbitrarios. Cabe mencionar que para $m \neq n$ el método no es conservativo, por lo que solo consideraremos el caso $m = n$. Finalmente, Shao y Wang [19], utilizando una aproximación en diferencias finitas de la segunda derivada de mayor precisión, mejoran este esquema duplicando el orden de convergencia espacial. El estudio numérico presentado en esos trabajos mostró un incremento sustancial en la precisión así como una reducción considerable en el tiempo de ejecución.

El presente trabajo tiene como propósito el estudio de un esquema numérico que aprovecha las propiedades del método LDG: alto orden en espacio, flexibilidad en el uso de mallas y no presentar obstáculos para ningún tipo de condiciones de borde; y las que ofrece la aproximación de Padé: alto orden en tiempo y conservación de invariantes. Mediante un breve análisis mostraremos que el método es conservativo independientemente del orden de aproximación espacial o temporal.

El artículo está organizado de la siguiente manera. En la Sec. 2, luego de una breve descripción de la ecuación de Schrödinger, presentamos la formulación semidiscreta del método LDG aplicado a dicha ecuación en dominios unidimensionales, teniendo como resultado un sistema lineal autónomo de ecuaciones diferenciales. El método de avance en tiempo, para la aproximación de este sistema se describe en la Sec. 3, mientras que la conservación de los invariantes discretos de probabilidad y energía se analizan en la Sec. 4. En la Sec. 5 se valida numéricamente las propiedades del esquema propuesto.

2. Discretización espacial LDG

La ecuación de Schrödinger describe la evolución del estado cuántico de una partícula de masa m mediante una función de valor complejo $\psi(x, t)$ cuya magnitud al cuadrado representa la densidad de probabilidad de la presencia de la partícula en la posición x en el instante t :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}(\psi), \quad (1)$$

donde \hbar es la constante de Planck reducida, $\mathcal{H}(\cdot) := -(\hbar^2/2m)\Delta(\cdot) + V(x, t)(\cdot)$ es el operador Hamiltoniano que describe la energía total del sistema. Este se compone de un operador relacionado con la energía cinética y otro con la energía inducida por el potencial $V : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $d = 1, 2, 3$, el cual consideraremos independiente del tiempo. Para una introducción al tema podría consultarse [13].

Por claridad en la presentación nos restringimos a dominios unidimensionales, para la discretización del operador laplaciano en el caso multidimensional se remite a [2, 3]. La Ec. (1) se aproxima en un dominio acotado $\Omega = [a, b]$ suficientemente grande para poder asumir condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas. Sea $\Omega_h = \{x_k\}_{k=0}^N$ una división, no necesariamente uniforme, del dominio Ω . Introduciendo la variable auxiliar $\mathbf{q} := -\psi_x$, reescribimos la ecuación de Schrödinger (1) como un sistema lineal de primer orden

$$0 = \mathbf{q} + \psi_x, \quad (2a)$$

$$i\hbar \psi_t = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}_x + V(x)\psi. \quad (2b)$$

Para cualquier tiempo $t > 0$, el método LDG busca una aproximación $(\psi_h(\cdot, t), \mathbf{q}_h(\cdot, t))$ en el espacio de elemento finito $\mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h$, $\mathcal{V}_h = \mathcal{Q}_h := \prod_{T \in \Omega_h} \mathbb{P}_{n_T}(T)$, donde $\mathbb{P}_{n_T}(T)$ es el espacio de polinomios de grado menor o igual a $n_T \geq 1$, el cual no tiene porque ser uniforme. Se denota por z^* el conjugado de un número complejo z . Aplicando integración por partes en cada celda, la restricción de la aproximación en $T_k = [x_k, x_{k+1}]$ debe satisfacer, para cualquier función de prueba $(v, \mathbf{r}) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{Q}_h$, el siguiente sistema

$$0 = \int_{T_k} \mathbf{q}_h \mathbf{r}^* + \widehat{\psi}_h \mathbf{r}^* \Big|_{x_k}^{x_{k+1}} - \int_{T_k} \psi_h \mathbf{r}_x^*, \quad (3a)$$

$$i\hbar \int_{T_k} \frac{d\psi_h}{dt} v^* = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\widehat{\mathbf{q}}_h v^* \Big|_{x_k}^{x_{k+1}} - \int_{T_k} \mathbf{q}_h v_x^* + s(\psi_h) v^* \Big|_{x_k}^{x_{k+1}} \right) + \int_{T_k} V(x) \psi_h v^*. \quad (3b)$$

Los llamados flujos numéricos, $\widehat{\psi}_h$ y $\widehat{\mathbf{q}}_h$, son aproximaciones de ψ y \mathbf{q} , respectivamente, en cada uno de los nodos de la división Ω_h . Estos se definen como combinaciones convexas

de las aproximaciones por la izquierda y derecha de las funciones ψ_h y q_h en los nodos x_k ; es decir, para $\lambda_k \in [0, 1]$:

$$\widehat{\psi}_h(x_k) := (1 - \lambda_k) \psi_h(x_k^-) + \lambda_k \psi_h(x_k^+), \quad (4a)$$

$$\widetilde{q}_h(x_k) := \lambda_k q_h(x_k^-) + (1 - \lambda_k) q_h(x_k^+). \quad (4b)$$

Son de particular interés los flujos direccionales; es decir, aquellos donde λ_k toma el mismo valor, ya sea 0 o 1, en cualquier nodo x_k . Por ejemplo, el flujo izquierdo se define haciendo $\lambda_k = 0$ mientras que en el flujo derecho $\lambda_k = 1$.

En cada nodo interior la función $s(\cdot)$ se define como el salto de ψ_h en el nodo x_k

$$s(\psi_h)(x_k) := \eta_k [\![\psi_h]\!]_k = \eta_k (\psi_h(x_k^-) - \psi_h(x_k^+)), \quad (5)$$

mientras que en los nodos extremos, simplemente como $s(\psi_h)(x_0) = \eta_0 \psi_h(x_0)$ y $s(\psi_h)(x_N) = \eta_N \psi_h(x_N)$. Esta función es un término de estabilización que garantiza la existencia de la solución para problemas elípticos. En la Ref. [3] se demostró la estabilidad del método para problemas elípticos cuando $\eta_k > 0$ en cualquier nodo. Sin embargo, asumiendo que los flujos numéricos son de tipo direccional, Cockburn y Dong [10] mostraron estabilidad aún cuando $\eta_k = 0$ en los nodos interiores. Para diferenciar esta versión de la original, esta se conoce como LDG de disipación mínima (mdLDG por sus siglas en inglés).

Sean M , D , G , V_h y S , respectivamente, la representación matricial de las siguientes formas sesquilineales, las cuales se obtienen al sumar las ecuaciones del sistema local (3a)-(3b) en todas las celdas

$$m_h(\psi_h, v) := \sum_{T_k \in \Omega_h} \int_{T_k} \psi_h v^*, \quad (6a)$$

$$a_h(q_h, r) := \sum_{T_k \in \Omega_h} \int_{T_k} q_h r^*, \quad (6b)$$

$$b_h(\psi_h, r) := \sum_{k=1}^{N-1} \widehat{\psi}_h [\![r^*]\!]_k - \sum_{T_k \in \Omega_h} \int_{T_k} \psi_h r^*, \quad (6c)$$

$$c_h(\psi_h, v) := \sum_{T_k \in \Omega_h} \int_{T_k} V(x) \psi_h v^*, \quad (6d)$$

$$s_h(\psi_h, v) := \sum_{k=0}^N \eta_k [\![\psi_h]\!]_k [v^*]_k. \quad (6e)$$

La formulación semidiscreta del método LDG aplicado a la ecuación de Schrödinger (1) se reduce a un sistema lineal autónomo de ecuaciones diferenciales

$$i\hbar M \frac{d\Psi_h}{dt} = H \Psi_h, \quad H := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_h + V_h, \quad (7)$$

donde $-\Delta_h := G^T D^{-1} G + S$ es la representación matricial del operador laplaciano discretizado por el método LDG y V_h es la del operador potencial. Ambas matrices tienen una

estructura de matriz hueca por bloques, donde cada bloque es de tamaño $p+1$ para aproximaciones de grado uniforme p . V_h es diagonal por bloques y simétrica no negativa para potenciales no negativos; mientras que la matriz $-\Delta_h$ es simétrica definida positiva; por lo que H también lo es. En lo que sigue asumiremos sin pérdida de generalidad que $\hbar := 1$.

3. Discretización temporal con aproximaciones de Padé

Con el fin de obtener alta precisión en tiempo, consideramos un método el cual se deriva de la siguiente observación. Sea A una matriz de coeficientes constantes, la solución $y(t)$ del problema de Cauchy $dy/dt = Ay(t)$, $y(0) = y_0$, satisface $y(t + \tau) = e^{\tau A} y(t)$, para cualquier incremento en tiempo $\tau > 0$. Esta expresión sugiere un método basado en la aproximación de la función exponencial. En concreto, sea m un número natural mayor o igual a 1, consideramos la aproximación $[m/m]$ -Padé definida como la función racional $R_m(z) = P_m(z)/Q_m(z)$ donde $P_m(\cdot)$ y $Q_m(\cdot)$ son los polinomios de grado m

$$P_m(z) := \sum_{k=0}^m a_k z^k, \quad Q_m(z) := \sum_{k=0}^m a_k (-z)^k, \quad (8a)$$

$$a_k := \frac{(2m-k)!}{(2m)!} \frac{m!}{k!(m-k)!}, \quad k = 0, \dots, m. \quad (8b)$$

La función racional $R_m(\cdot)$ aproxima la función exponencial con orden $2m+1$; es decir, $|e^z - R_m(z)| = O(|z|^{2m+1})$ cuando $|z|$ tiende a 0. Además como $Q_m(z) = R_m(-z)$ se tiene una relación entre las raíces de ambos polinomios. Denotando por $r_{m,k} := \alpha_{m,k} + i\beta_{m,k}$ las raíces de $Q_m(\cdot)$, se tiene que $-r_{m,k}$ es raíz de $P_m(\cdot)$. Por otro lado, puesto que los coeficientes de ambos polinomios son reales, $r_{m,k}^*$ también es raíz, lo cual permite expresar $R_m(\cdot)$ de manera más sencilla

$$R_m(z) = \prod_{k=1}^m \left(\frac{1 + z/r_{m,k}^*}{1 - z/r_{m,k}} \right). \quad (9)$$

Esta expresión define un esquema de avance en tiempo para la formulación semi discreta (7): para un incremento de tiempo $\tau > 0$, la aproximación de Ψ_h^n en el tiempo discreto $t_n := t_{n-1} + \tau = n\tau$ se calcula de acuerdo a la siguiente iteración, la cual llamaremos iteración $[m/m]$ -Padé-LDG,

$$Q_m(-i\tau M^{-1}H) \Psi_h^n = P_m(-i\tau M^{-1}H) \Psi_h^{n-1}. \quad (10)$$

La existencia de Ψ_h^n depende de la no singularidad de la matriz $Q_m(-i\tau M^{-1}H)$, la cual está directamente relacionada con la distribución de las raíces de $Q_m(\cdot)$ (o de $P_m(\cdot)$). La localización de estas fue inicialmente estudiada por Birkhoff y Varga [1] para el caso $m = n$; por Ehle [12], para $n \leq m+2$; zonas más específicas fueron obtenidas por Saff y Varga en una serie de artículos, para mayores detalles se podrá consultar [17] y sus referencias. El siguiente resultado, Lema 7 p.18 [1], permitirá garantizar que la iteración (10) está bien

definida; es decir, que ese sistema lineal admite solución única, independientemente del valor de τ .

Teorema 1. (Birkhoff y Varga [1]) *Para cualquier entero $m \geq 1$. Las raíces del polinomio $Q_m(z)$ (8a), en la aproximación $[m/m]$ -Padé de la función exponencial, se encuentran en el semiplano abierto*

$$\mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) > 0\}.$$

Proposición 1. *La iteración $[m/m]$ -Padé-LDG (10) está bien definida para cualquier $\tau > 0$.*

Prueba. Es suficiente mostrar que cada uno de los factores de $Q_m(-i\tau M^{-1}H)$, los cuales son de la forma $(I + i[\tau/r_{m,k}]M^{-1}H)$ con $r_{m,k}$ raíz de $Q_m(\cdot)$, es no singular. Procedemos por contradicción, supongamos que existe $x_o \in \mathbb{C}^N$, tal que $x_o \neq 0$ y $(I + i[\tau/r_{m,k}]M^{-1}H)x_o = 0$. Siendo M una matriz simétrica positiva definida, esta admite una factorización de Cholesky, $M = LL^T$, por lo que

$$(L^{-1}HL^{-T})L^T x_o = i \frac{r_{m,k}}{\tau} L^T x_o. \quad (11)$$

Por lo tanto $i(r_{m,k}/\tau)$ es un valor propio de $L^{-1}HL^{-T}$. Sin embargo esta matriz es simétrica, luego $i(r_{m,k}/\tau) \in \mathbb{R}$, lo cual equivale a tener $\operatorname{Re}(r_{m,k}) = 0$, por lo tanto $r_{m,k} \notin \mathbb{C}^+$ lo cual contradice el Teorema 1. \square

Nótese que el resultado anterior también es válido para cualquier discretización del operador laplaciano cuya matriz es simétrica, como por ejemplo la obtenida por el método de elemento finito clásico (continuo) y obviamente para diferencias finitas. Además aplica naturalmente a dominios multidimensionales y problemas con condiciones periódicas.

La iteración (10) revela muy poca información sobre las propiedades del método, por lo que es más conveniente reescribirla como una secuencia de pasos similares a los del punto medio, $[1/1]$ -Padé):

$$\left(M + i\frac{\tau}{2}H\right)\Psi_h^n = \left(M - i\frac{\tau}{2}H\right)\Psi_h^{n-1}. \quad (12)$$

Proposición 2. *La iteración $[m/m]$ -Padé-LDG (10) puede reescribirse como una secuencia de m -pasos que poseen la misma estructura: sea $\Psi_h^{(0)} := \Psi_h^{n-1}$, para $k = 1, \dots, m$ resuelva para $\Psi_h^{(k)}$ el sistema lineal*

$$\left(M + i\frac{\tau}{r_{m,k}}H\right)\Psi_h^{(k)} = \left(M - i\frac{\tau}{r_{m,k}^*}H\right)\Psi_h^{(k-1)}, \quad (13)$$

finalmente defina $\Psi_h^n := \Psi_h^{(m)}$.

Prueba. De acuerdo a la no singularidad de los factores de $Q_m(\cdot)$, Proposición 1, la iteración (10) puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \Psi_h^n &= Q_m(-i\tau M^{-1}H)^{-1} P_m(-i\tau M^{-1}H)\Psi_h^{n-1}, \quad (14a) \\ &= \prod_{k=1}^m \left(I + i\frac{\tau}{r_{m,k}}M^{-1}H\right)^{-1} \\ &\quad \times \left(I - i\frac{\tau}{r_{m,k}^*}M^{-1}H\right)\Psi_h^{n-1}, \quad (14b) \end{aligned}$$

donde la igualdad (14b) se justifica por la conmutatividad de los factores de $P_m(\cdot)$ y $Q_m(\cdot)$. Sea $\Psi_h^{(0)} := \Psi_h^{n-1}$, la evaluación de este producto se realiza como una secuencia de m pasos, para $k = 1, \dots, m$ se resuelve el sistema

$$\begin{aligned} \left(I + i\frac{\tau}{r_{m,k}}M^{-1}H\right)\Psi_h^{(k)} \\ = \left(I - i\frac{\tau}{r_{m,k}^*}M^{-1}H\right)\Psi_h^{(k-1)}, \quad (15) \end{aligned}$$

el cual es equivalente al sistema (13). \square

4. Conservación de invariantes

Recordemos que la ecuación de Schrödinger conserva la probabilidad y la energía del sistema, por lo que es de sumo interés determinar si el método $[m/m]$ -Padé-LDG conserva los análogos discretos de estos invariantes, los cuales se definen formalmente para cualquier t_n como

$$\mathcal{P}^n := \int_{\Omega} \psi_h(\cdot, t_n)^* \psi_h(\cdot, t_n) = \langle M\Psi_h^n, \Psi_h^n \rangle, \quad (16a)$$

$$\mathcal{E}^n := \int_{\Omega} \psi_h(\cdot, t_n)^* H \psi_h(\cdot, t_n) = \langle H\Psi_h^n, \Psi_h^n \rangle. \quad (16b)$$

No está por demás recordar que los métodos explícitos Runge-Kutta, (Euler y Trapecio explícito por citar algunos) no conservan ninguno de estos invariantes [9].

Proposición 3. (Conservación de invariantes) *El método $[m/m]$ -Padé-LDG conserva los análogos discretos de la probabilidad (16a) y de la energía (16b).*

Prueba. Utilizando la expresión de Ψ_h^n obtenida en (14b), la conservación de la probabilidad se reduce a probar que una matriz de la forma

$$U := (I + i\alpha M^{-1}H)^{-1} (I - i\alpha^* M^{-1}H), \quad (17)$$

es unitaria con respecto al producto interior $\langle x, y \rangle_M := \langle Mx, y \rangle$; es decir $U^*MU = M$. Por la simetría de las matrices reales M y H se tiene

$$U^* = M(I + i\alpha M^{-1}H)(M - i\alpha^* H)^{-1}. \quad (18)$$

Por otro lado, nótese que por la conmutatividad de los factores de U ,

$$MU = (M - i\alpha^* H)(I + i\alpha M^{-1}H)^{-1}. \quad (19)$$

El resultado se obtiene combinando las expresiones obtenidas en las Ecs. (18) y (19).

Para la conservación del invariante discreto de la energía, comenzamos reescribiendo el sistema (13) en una forma más conveniente para el análisis de la conservación

$$\begin{aligned} \frac{i}{\tau} M \left(\Psi_h^{(k)} - \Psi_h^{(k-1)}\right) \\ = H \left(\frac{1}{r_{m,k}} \Psi_h^{(k)} + \frac{1}{r_{m,k}^*} \Psi_h^{(k-1)}\right). \quad (20) \end{aligned}$$

Considerando la parte real del producto interior en la ecuación anterior con el vector $\Psi_h^{(k)} - \Psi_h^{(k-1)}$ y la simetría de M se tiene

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Re} \left\langle H \left(\frac{1}{r_{m,k}} \Psi_h^{(k)} + \frac{1}{r_{m,k}^*} \Psi_h^{(k-1)} \right), \Psi_h^{(k)} - \Psi_h^{(k-1)} \right\rangle \\ &= \frac{\alpha_{m,k}}{|r_{m,k}|^2} \left(\langle H \Psi_h^{(k)}, \Psi_h^{(k)} \rangle - \langle H \Psi_h^{(k-1)}, \Psi_h^{(k-1)} \rangle \right), \\ &= \frac{\alpha_{m,k}}{|r_{m,k}|^2} \left(\mathcal{E}^{(k)} - \mathcal{E}^{(k-1)} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

la segunda igualdad se obtuvo gracias a la simetría de H . La conservación de la energía se obtiene del resultado sobre la localización de las raíces de $Q_m(\cdot)$, Teorema 3, el cual indica que la parte real de $r_{m,k}$, $\alpha_{m,k}$, no es nula. \square

5. Validación numérica

Los siguientes experimentos numéricos se realizaron en Octave con aritmética de números complejos de doble precisión. El error en el tiempo final t se calcula en la norma L^2 ; es decir

$$\text{err}(t) := \sqrt{\int_{\Omega} |\psi_h(x, t) - \psi(x, t)|^2 dx}, \quad (22)$$

donde la integral se aproxima numéricamente mediante integración compuesta utilizando una cuadratura de Gauss-Legendre de 25 puntos en cada celda. La base local del espacio de elemento finito \mathcal{V}_h consiste de polinomios ortogonales de Legendre, lo cual facilita la implementación del método si

se consideran aproximaciones de grado variable en cada celda. En cada paso de tiempo se consideró la iteración (13) de la Proposición 2. Puesto que solo estamos considerando problemas unidimensionales, las matrices son tridiagonales por bloques, por lo que en la fase de inicialización se calcula la factorización LU de cada una de las m matrices que aparecen en el sistema lineal de (13). En todos los experimentos se utilizó la versión del método LDG de disipación mínima (mdLDG) con el flujo en la dirección de izquierda a derecha. Sin embargo, resultados similares se obtuvieron con el flujo en la dirección opuesta, los cuales omitidos por brevedad.

Ejemplo 1: estados estacionarios. Consideramos el problema de una partícula atrapada en un pozo $\Omega = [0, L]$ de potencial infinito. Para las condiciones iniciales $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(k_n x)$, $k_n = n\pi/L$, la solución exacta es $\psi(x, t) = \psi_n(x) \exp(-i \frac{E_n}{\hbar} t)$ donde $E_n = (k_n \hbar)^2 / (2m)$ es el nivel de energía.

En la Tabla I se muestran las tasas de convergencia en tiempo para la aproximación del estado estacionario $n = 50$ en el dominio $[0, 100]$ para una partícula de masa unitaria y $\hbar = 1$. Estas se obtienen a partir de los errores obtenidos de dos incrementos de tiempo consecutivos. El dominio se discretizó con una malla uniforme de 100 segmentos; y para la aproximación espacial se consideró una distribución uniforme de polinomios de grado 10 en todas las celdas; lo cual garantiza que el error global este dominado por el error en tiempo.

En la Tabla II claramente muestra el orden de convergencia en espacio que predice la teoría, el cual debe ser de orden h^{p+1} para aproximaciones uniformes de grado p y soluciones

TABLA I. Errores y tasas de convergencia en tiempo del Ejemplo 1 para $T_{\text{final}} = 1000$. El valor inicial de τ_o correspondiente a cada una de las aproximaciones de Padé fue 0.5, 1, 4 y 4 respectivamente.

	[2/2]-Padé		[3/3]-Padé		[4/4]-Padé		[5/5]-Padé	
	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
τ_o	1.2116e-01	—	4.0647e-02	—	1.4485e+00	—	5.7025e-01	—
$\tau_o/2$	7.7087e-03	3.97	6.6433e-04	5.94	5.5672e-02	4.70	8.8785e-04	9.33
$\tau_o/2^2$	4.8385e-04	3.99	1.0496e-05	5.98	2.4925e-04	7.80	9.6644e-07	9.84
$\tau_o/2^3$	3.0273e-05	4.00	1.6445e-07	6.00	1.0068e-06	7.95	9.6024e-10	9.98
$\tau_o/2^4$	1.8925e-06	4.00	2.5642e-09	6.00	3.9607e-09	7.99	9.0860e-12	6.72

TABLA II. Errores y tasas de convergencia en espacio del Ejemplo 1 para $T_{\text{final}} = 100$. El valor inicial de los parámetros de discretización (h_o, τ_o) correspondiente a cada grado p fue (0.25, 0.5), (0.5, 0.5), (2, 0.25) y (2, 0.25) respectivamente.

	$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$		$p = 5$	
	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
τ_o, h_o	6.5291e-04	—	1.2977e-04	—	8.0272e-03	—	1.0196e-03	—
$\tau_o/2, h_o/2$	5.5075e-05	3.57	7.5532e-06	4.10	1.5095e-04	5.73	8.5329e-06	6.90
$\tau_o/2^2, h_o/2^2$	5.4064e-06	3.35	5.2400e-07	3.85	4.6071e-06	5.03	1.5468e-07	5.79
$\tau_o/2^3, h_o/2^3$	6.1774e-07	3.13	2.8663e-08	4.19	1.6290e-07	4.82	2.5781e-09	5.91
$\tau_o/2^4, h_o/2^4$	7.5278e-08	3.04	1.7940e-09	4.00	4.8643e-09	5.07	4.2077e-11	5.94

TABLA III. Errores y tasas de convergencia en tiempo del Ejemplo 2 para $T_{\text{final}} = 10^{-2}$. El valor inicial de τ_o correspondiente a cada una de las aproximaciones de Padé fue 10^{-4} , 5×10^{-4} , 2×10^{-3} y 5×10^{-3} respectivamente.

	[2/2]-Padé		[3/3]-Padé		[4/4]-Padé		[5/5]-Padé	
	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
τ_o	3.6719e-04	—	5.1907e-03	—	5.6941e-01	—	1.4306e+00	—
$\tau_o/2$	2.3095e-05	3.99	9.2368e-05	5.81	1.5383e-02	5.21	4.5164e-01	1.66
$\tau_o/2^2$	1.4457e-06	4.00	1.4902e-06	5.95	9.6342e-05	7.32	5.9832e-03	6.24
$\tau_o/2^3$	9.0395e-08	4.00	2.3474e-08	5.99	4.2262e-07	7.83	1.1599e-05	9.01
$\tau_o/2^4$	5.6591e-09	4.00	4.8592e-10	5.59	1.7288e-09	7.93	1.3450e-08	9.75

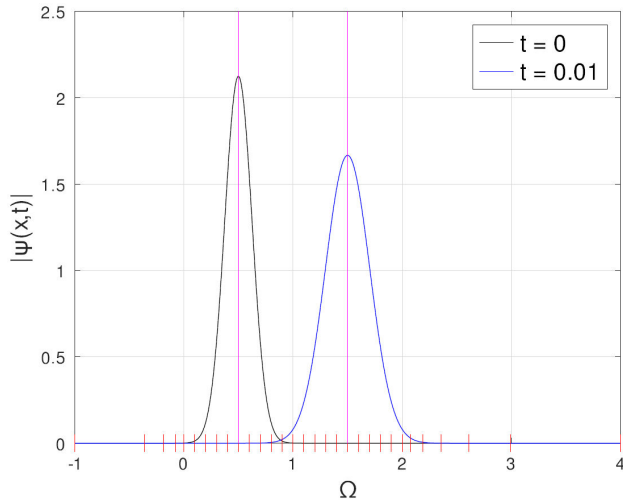


FIGURA 1. Estado inicial y final de la onda del Ejemplo 2. Utilizando la aproximación [5/5]-Padé-LDG con $p = 12$ para una malla no uniforme.

suficientemente regulares. Los resultados numéricos se obtuvieron aplicando [3/3]-Padé-LDG a una secuencia de mallas uniformes. Los parámetros de discretización (h , τ) se indican en la Tabla II.

Ejemplo 2: partícula libre. Estudiamos el comportamiento del método en un problema más dinámico que describe la evolución de un paquete de onda gaussiana que se propaga libremente; es decir, donde $V(x) = 0$. La expresión

exacta es ampliamente conocida, [13, 21], definiendo $\mu(t) := 1 + (i\hbar t)/(m\sigma^2)$, $\mu = (\sigma^2\pi)^{-1/4}$ se tiene

$$\psi(x, t) = \frac{\mu}{\sqrt{\mu(t)}} \exp\left(-\frac{1}{2\mu(t)} \left(\frac{x - x_o}{\sigma}\right)^2\right) \times \exp\left(\frac{ik_o(x - x_o) - i\hbar k_o^2 t/(2m)}{\mu(t)}\right). \quad (23)$$

En la Tabla III se muestran los errores y tasas de convergencia en tiempo, los cuales muestran claramente orden τ^{2m} para aproximaciones $[m/m]$ -Padé. El experimento se llevó a cabo utilizando los siguientes valores numéricos $\hbar = 1$, $m = 1/2$, $x_o = 1/2$, $\sigma = 0.125$ y $k_o = 50$. Para la discretización espacial se consideró grado uniforme $p = 12$, lo cual asegura que el error en tiempo es el dominante; además para mostrar la flexibilidad del método de elemento finito hemos utilizado una malla no uniforme con apenas 30 celdas la cual se ilustra en la Fig. 1. El dominio $\Omega = [-1, 4]$ asegura que la onda no se verá afectada por imponer condiciones de Dirichlet homogéneas. Concentramos las celdas en la zona $[0, 2]$ donde se necesita más precisión, mientras que las celdas de mayor diámetro se utilizan en los extremos del intervalo. El diámetro mínimo de las celdas es $h_{\text{mín}} = 5 \times 10^{-2}$ mientras que el máximo es $h_{\text{máx}} = 1.0109375$, aproximadamente 20 veces más grande. En la figura se muestra $|\psi(x, t)|$ en el tiempo inicial y final, las barras muestran que la posición del

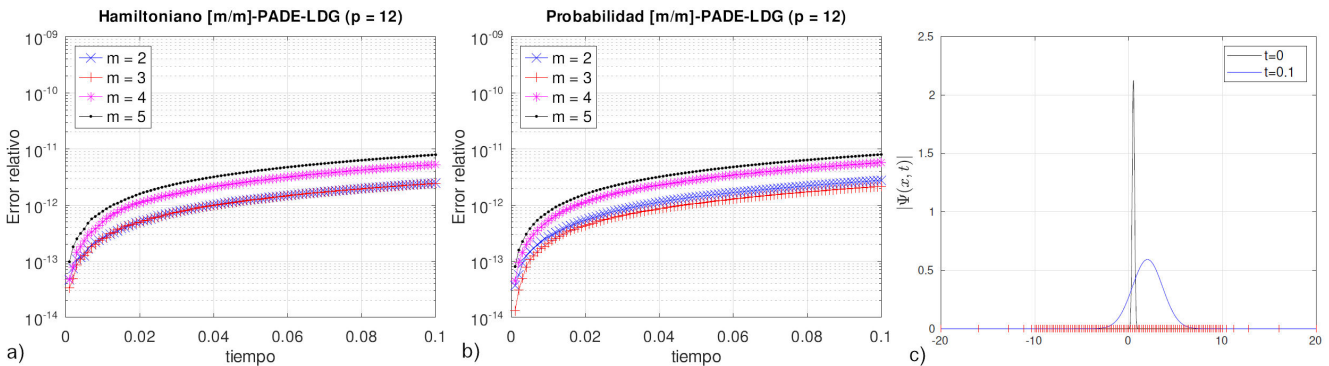


FIGURA 2. Conservación de los invariantes del Ejemplo 2; estado inicial y final del paquete de onda.

TABLA IV. Comportamiento del error para la misma cantidad de grados de libertad (3000) en $T_{\text{final}} = 10^{-1}$, $\tau = 0.25 \times 10^{-4}$.

p	N	Error
1	1500	1.0971e-02
2	1000	1.0582e-03
3	750	1.2969e-04
4	600	1.7148e-05
5	500	2.4474e-06
9	300	2.5308e-09

centro del paquete de onda coincide con el valor exacto que predice la teoría $x_c = x_o + V_o t$ donde la velocidad $V_o = (\hbar k_o)/m$, por lo que para nuestros valores numéricos $x_c = x_o + 2k_o t = 1.5$.

La conservación de la probabilidad y de la energía para distintas aproximaciones de Padé se muestra en la Fig. 2. Cabe mencionar que por tratarse de una partícula libre la energía es estrictamente cinética. Con el propósito de mostrar la conservación de los invariantes en un período de tiempo un poco más largo en comparación al utilizado en la Tabla III, consideramos las siguientes valores $k_o = 7.5$ y $T_{\text{final}} = 10^{-1}$, por lo que el ancho del paquete de onda es más pronunciado y su centro en el tiempo final se localiza en $x_c = 2.0$. Tomando en cuenta estas características el experimento se realizó para una malla no uniforme en el dominio $\Omega = [-20, 20]$, ver Fig. 2. El incremento en tiempo fue $\tau = 0.25 \times 10^{-4}$ para un total de 4000 pasos.

A continuación ilustramos la ventaja de considerar aproximaciones espaciales de alto orden para problemas suficientemente regulares. Recordemos que para aproximaciones espaciales de grado uniforme p en una malla de N celdas, la cantidad total de incógnitas del sistema discreto (grados de libertad) es igual a $(p + 1)N$. En la Tabla IV comparamos la precisión de la aproximación para un número fijo de grados de libertad (3000), por lo que consideramos p y N de tal forma que $(p + 1)N = 3000$. Los datos del cuadro refieren a la propagación de una partícula libre donde se utilizaron los siguientes valores numéricos $\Omega = [-5, 15]$, $x_0 = 0$, $k_o = 25$, $\sigma_o = 0.125$. Para la discretización en tiempo se utilizó [4/4]-Padé-LDG con el mismo incremento en tiempo $\tau = 0.25 \times 10^{-4}$ para cualquier p . Nótese como el error en la aproximación decrece a medida que el grado del polinomio aumenta, manteniendo la misma cantidad de grados de libertad. Claramente se observa que es más conveniente considerar aproximaciones de alto orden en problemas de mucha regularidad. Para tener una idea de la eficiencia relativa del uso de alto orden en espacio, el tiempo de ejecución para $p = 9$ fue aproximadamente 2.5 veces más que el de $p = 1$, sin embargo el error es 7 órdenes de magnitud más pequeño que el de $p = 1$, lo cual favorece el uso de aproximaciones de alto orden.

Ejemplo 3: oscilador armónico cuántico. Validamos la conservación y la convergencia en tiempo en un problema os-

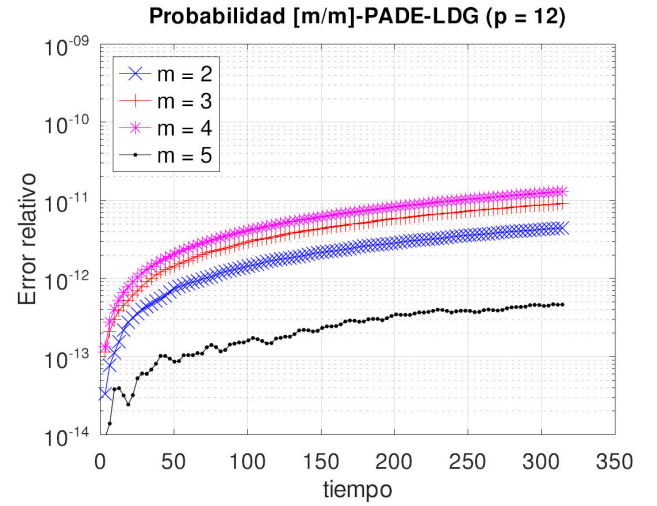


FIGURA 3. Evolución del error relativo de la probabilidad para el problema del Ejemplo 3.

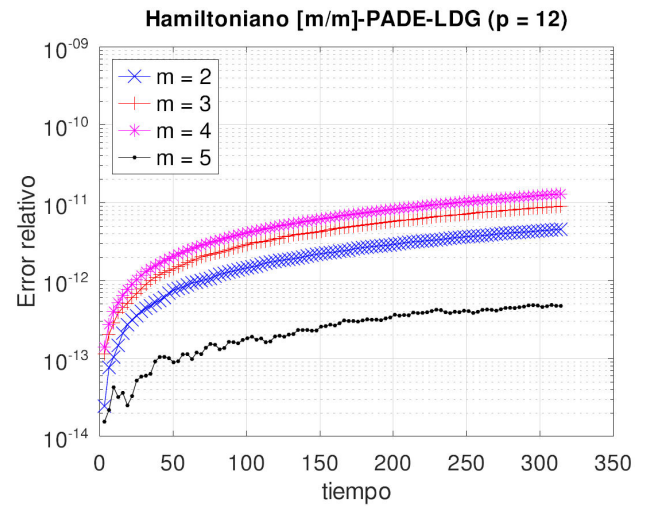


FIGURA 4. Evolución del error relativo de la energía para el problema del Ejemplo 3.

tilatorio de potencial cuadrático $V(x) = (1/2)m\omega^2 x^2$, cuya solución ha sido discutida en Shiff Cap. 13, Pág 75, [20]

$$\psi(x, t) = \sqrt[4]{\frac{1}{\sigma^2 \pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\xi - \xi_o \cos(\omega t))^2\right) \times \exp\left(-i\left[\frac{1}{2}\omega t + \xi \xi_o \sin(\omega t) - \frac{1}{4}\xi_o^2 \sin(2\omega t)\right]\right), \quad (24)$$

donde $\xi := x/\sigma$, $\xi_o := x_o/\sigma$.

La conservación de la probabilidad y de la energía se ilustra en las Figs. 3 y 4; donde se muestra el error relativo con respecto a los invariantes en el instante inicial para aproximaciones de grado $p = 12$ en espacio y distintas aproximaciones de Padé. La escala muestra claramente la propiedad conservativa del método.

TABLA V. Errores y tasas de convergencia en tiempo del Ejemplo 3 para $T_{\text{final}} = 10\pi$. El valor inicial de τ_o correspondiente a cada una de las aproximaciones de Padé fue $\pi/8$, $\pi/8$, π y π respectivamente.

	[2/2]-Padé		[3/3]-Padé		[4/4]-Padé		[5/5]-Padé	
	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
τ_o	8.2014e-01	—	2.5282e-02	—	1.2417e+00	—	1.1253e+00	—
$\tau_o/2$	1.0599e-01	2.95	4.3123e-04	5.87	8.2801e-01	0.58	2.8348e-01	1.99
$\tau_o/2^2$	6.9167e-03	3.94	6.8706e-06	5.97	5.0083e-02	4.05	1.9346e-03	7.20
$\tau_o/2^3$	4.3486e-04	3.99	1.0765e-07	6.00	2.8712e-04	7.45	2.4944e-06	9.60
$\tau_o/2^4$	2.7219e-05	4.00	1.6597e-09	6.02	1.2051e-06	7.90	2.6612e-09	9.87

En la Tabla V se presenta el error y las tasas de convergencia en tiempo, para una malla uniforme de 2000 celdas en el dominio $\Omega = [-40, 40]$ y aproximaciones de grado uniforme $p = 12$, lo cual asegura que el error está dominado por la aproximación en tiempo y no en espacio. El error se obtuvo para el tiempo final $T = 100\pi$; el cual corresponde a 10 períodos de oscilación. Los parámetros para este experimento fueron los utilizados en las Refs. [19, 21]: $x_o = 10$, $\hbar := 1$ y $m = 1$, $\omega = 0.2$ y $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Las tasas obtenidas muestran claramente orden de convergencia τ^{2m} para aproximaciones $[m/m]$ -Padé.

Ejemplo 4: barrera de potencial. Estudiamos el comportamiento de la iteración $[m/m]$ -Padé-LDG para una onda gaussiana que atraviesa una barrera de potencial. La dinámica de este problema fue ilustrada por primera vez en Goldberg, Schey y Schwartz [14], donde los autores realizaron un estudio minucioso de los parámetros de discretización para diferencias finitas de segundo orden en espacio y el método

de Crank-Nicolson en tiempo. Los valores numéricos en nuestro experimento son similares a los utilizados en [14], $\Omega = [-0.5, 1.5]$, $\hbar = 1$, $m = 1/2$, $\sigma = 0.05$, $k_o = 50\pi$, $x_o = 0.25$, el valor del potencial es igual al valor promedio de la energía

$$V(x) := \begin{cases} (50\pi)^2 & \text{para } x \in [0.46, 0.54], \\ 0 & \text{para } x \notin [0.46, 0.54]. \end{cases} \quad (25)$$

Para la simulación se consideraron los siguientes parámetros: el dominio Ω se dividió uniformemente en 100 intervalos, $h = 0.02$ y la aproximación espacial se realizó con polinomios de grado $p = 9$ para un total de 1000 grados de libertad; el avance en tiempo consistió de 100 pasos ($\tau = 1.6 \times 10^{-5}$) con aproximaciones $[4/4]$ -Padé-LDG. Cabe mencionar que los parámetros h y τ son más grandes que los utilizados en la Ref. [14]. En la Fig. 5 se ilustra el comportamiento de $|\psi_h(x, t)|$ para ciertos instantes de tiempo.

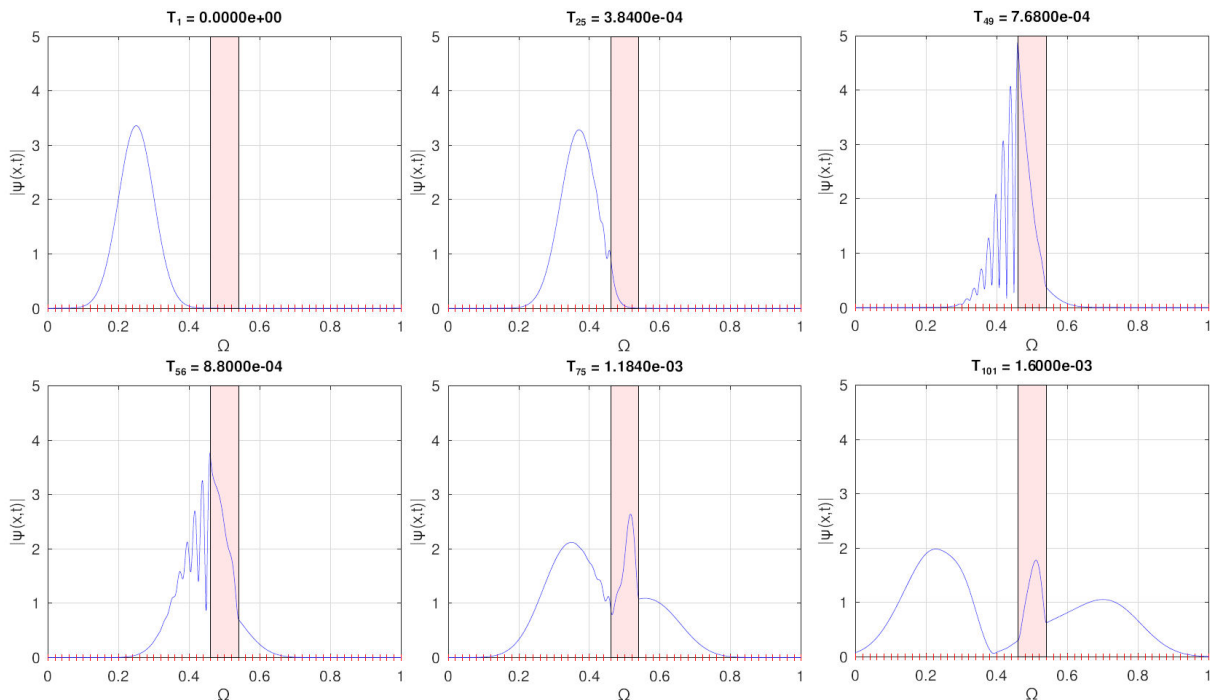


FIGURA 5. Evolución de $|\psi_h(x, t)|$ para el problema del Ejemplo 4.

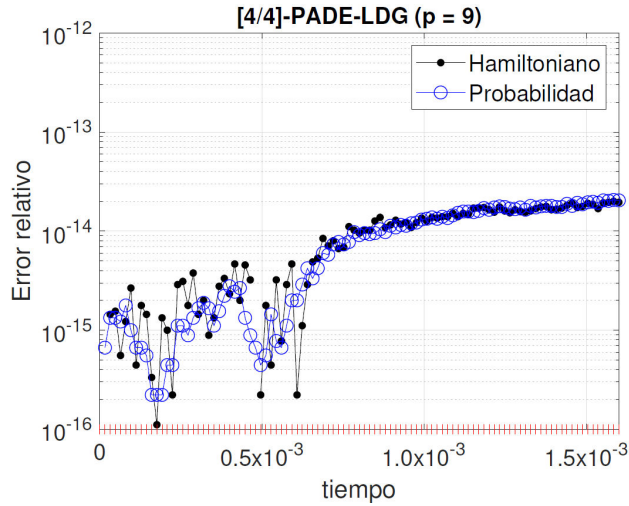


FIGURA 6. Evolución del error relativo de la probabilidad y de la energía para el problema del Ejemplo 4.

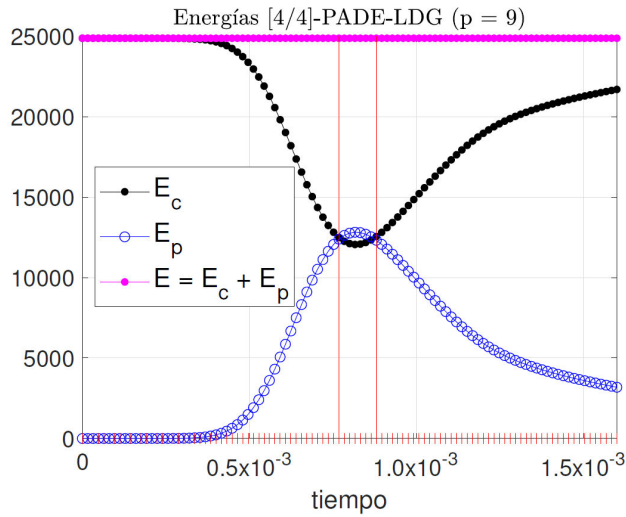


FIGURA 7. Evolución de las energías: cinética, potencial y total para el problema del Ejemplo 4.

En este ejemplo la evolución de la energía es mucho más interesante debido a la presencia del potencial discontinuo. En la Fig. 6 se valida la conservación de ambos invariantes; mientras que en la Fig. 7 se presenta la evolución de todas las energías: cinética, potencial y total. Nótese que en el intervalo de tiempo $[7.68 \times 10^{-4}, 8.8 \times 10^{-4}]$ la energía potencial supera la cinética debido a que una buena parte de la onda queda atrapada en la barrera.

Ejemplo 5: experimento de la rendija en 2D. Estudiamos la dinámica de una partícula libre que atraviesa una rendija con distintas longitudes. La función de onda inicial se modela como un pulso Gaussiano

$$\psi_h(\mathbf{x}, t) := \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{i\mathbf{k}_o \cdot \mathbf{x}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_o\|}{\sigma}\right)^2}. \quad (26)$$

el cual se encuentra inicialmente centrado en $\mathbf{x}_o = (-0.5, 0)$ con $\sigma = 0.125$ y $\mathbf{k}_o = (50, 0)$. En ausencia de la rendija el

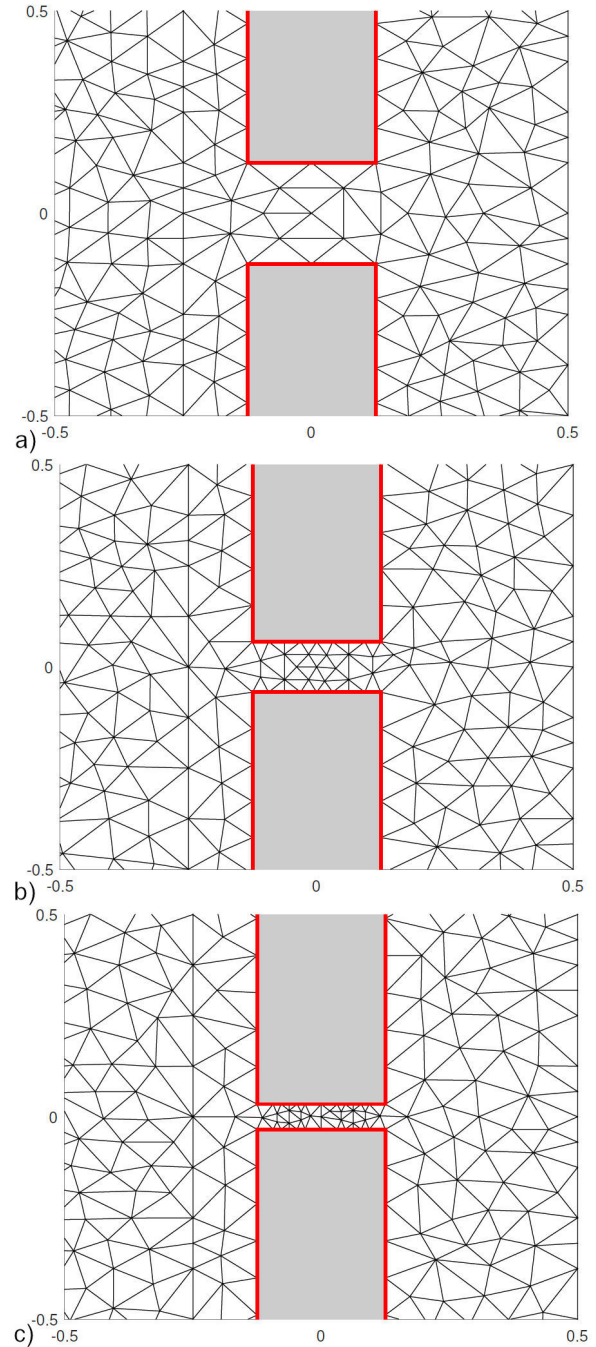


FIGURA 8. Información básica de las mallas $L(\sigma) = 2\sigma, \sigma, \sigma/2$ para $\sigma = 0.125$.

pulso avanzaría de izquierda a derecha manteniendo su forma pero incrementando su ancho. En el instante $t = 10^{-2}$ el centro del pulso se localizaría en $\mathbf{x}_c = (0.5, 0)$.

Para la simulación se utilizaron tres mallas conformes no estructuradas, las cuales fueron generadas por el paquete *Triangle* [18], ver Fig. 7. Se consideró una ranura centrada en el origen, de ancho fijo $W(\sigma) = 2\sigma$ y tres valores para el largo $L(\sigma) = 2\sigma, \sigma, \sigma/2$. El dominio computacional es $\Omega = [-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5]$, el cual es suficientemente grande para poder imponer condiciones de contorno de Diri-

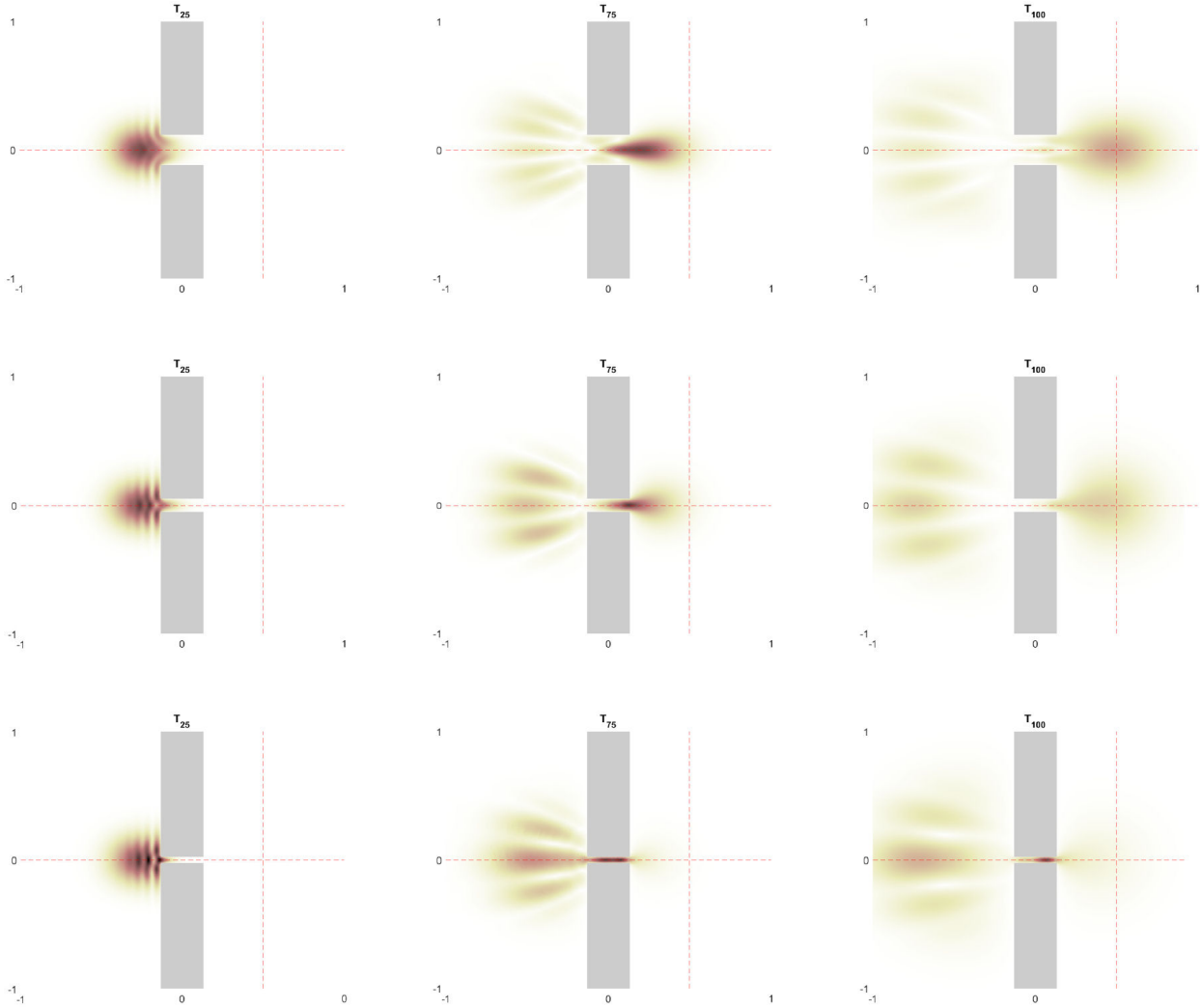


FIGURA 9. Evolución de la onda para distintas longitudes de la rendija. Parámetros: $\hbar = 1$, $m = 1/2$ $\sigma = 0.125$.

TABLA VI. Información básica de las mallas $L(\sigma) = 2\sigma, \sigma, \sigma/2$ para $\sigma = 0.125$

N	h_{\min}	h_{\max}	a_{\min}	a_{\max}
2645	6.25e-02	1.72e-01	1.69e-03	4.99e-03
2643	3.13e-02	1.56e-01	4.27e-04	4.99e-03
2674	1.56e-02	1.56e-01	1.22e-04	4.99e-03

chlet homogéneas y que estas no alteren el comportamiento de la onda. Algunos detalles geométricos como el número total de celdas N , la menor y la mayor longitud de todas las aristas, h_{\min} y h_{\max} ; la menor y la mayor área de todas las celdas, a_{\min} y a_{\max} ; se muestran en la Tabla VI.

Los cálculos se realizaron con el esquema temporal [2/2]-Padé-LDG, con un incremento en tiempo $\tau = 10^{-4}$ y un total de $N_t = 100$ pasos para el tiempo final $T_{\text{final}} = 10^{-2}$. En espacio se utilizaron aproximaciones de grado uniforme $p = 6$,

por lo que la dimensión del espacio local de elemento finito es igual a 28. Puesto que el número total de celdas es aproximadamente el mismo en todas las mallas, la cantidad total de grados de libertad es prácticamente el mismo. Sin embargo, en comparación con el método de diferencias finitas, la discretización del dominio es más flexible ya que no requiere de celdas uniformes.

En la Fig. 9 se ilustra la dinámica de la onda para las tres rendijas en los tiempos $T_n = n \times 10^{-4}$, $n = 25, 75$ y 100 . Independientemente del tamaño de la rendija, antes del instante $T_{25} = 25 \times 10^{-4}$ el pulso se comporta esencialmente de la misma forma. Lo cual es de esperar debido a que el pulso aún no ha alcanzado a tener contacto con las paredes de la ranura. Las gráficas de los instantes T_{75} y T_{100} ilustran claramente la influencia del largo de la rendija en el comportamiento de la onda. Parte de esta atraviesa la rendija y parte rebota, como es de esperar el rebote es más pronunciado para una rendija de menor longitud. Además se observa que el

centro de la porción que atraviesa la rendija no alcanza el centro $x_c = (0.5, 0)$ (en ausencia de rendija).

6. Conclusiones

Hemos presentado un esquema numérico basado en el método de elemento finito discontinuo LDG en espacio y aproximaciones de Padé en tiempo. Esta combinación de discretizaciones permiten obtener aproximaciones de alta precisión en espacio y tiempo para problemas donde la solución es suficientemente regular; además se ilustró que para este tipo de soluciones es conveniente utilizar pocas celdas con aproximaciones de alto orden en espacio.

Aunque hemos ilustrado la flexibilidad que ofrecen este tipo de discretizaciones espaciales al considerar mallas no uniformes, estas fueron construidas teniendo cierto conocimiento *a-priori* del comportamiento de la solución. El desarrollo de una técnica adaptativa en espacio en donde, sin conocimiento previo de la solución, la malla se adapte a la evolución de la onda, es un trabajo en progreso. Esperamos que el impacto sea aún mayor para problemas multidimensionales donde realmente podemos considerar mallas no conformes, las cuales no son permitidas en el método de elemento finito continuo tradicional. Otra dirección de investigación es el desarrollo de estimados de error *a-posteriori* para el grado de aproximación en cada celda.

1. G. Birkhoff and R.S. Varga, Discretization errors for well-set Cauchy problems. *J. Mathematical and Physics*, **44** (1965) 1-23. <https://doi.org/10.1002/sapm19654411>
2. P. Castillo, Performance of discontinuous Galerkin methods for elliptic PDE's. *SIAM J. Sci. Comput.*, **24** (2002) 524. <https://doi.org/10.1137/S1064827501388339>
3. P. Castillo, B. Cockburn, I. Perugia and D. Schötzau, An a priori error analysis of the Local Discontinuous Galerkin method for elliptic problems. *SIAM J. Num. Anal.*, **38** (2000) 1676. <https://doi.org/10.1137/S0036142900371003>
4. P. Castillo and S. Gómez, Conservative Local Discontinuous Galerkin method for the fractional Klein-Gordon-Schrödinger system with generalized Yukawa interaction. *Numerical Algorithms*, **84** (2020) 407. <https://doi.org/10.1007/s11075-019-00761-3>
5. P. Castillo and S. Gómez, On the Conservation of Fractional Nonlinear Schrödinger Equation's Invariants by the Local Discontinuous Galerkin Method. *J. Scientific of Computing*, **77** (2018) 1444. <https://doi.org/10.1007/s10915-018-0708-8>
6. P. Castillo and S. Gómez, Conservación de invariantes de la ecuación de Schrödinger no lineal por el método LDG. *Rev. Mex. Fís. E*, **64** (2018) 52. <https://doi.org/10.31349/RevMexFisE.64.52>
7. P. Castillo and S. Gómez, Conservative super-convergent and hybrid discontinuous Galerkin methods applied to nonlinear Schrödinger equations. *Applied Mathematics and Computation*, **371** (2020) 124950. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2019.124950>
8. P. Castillo and S. Gómez, Conservative local discontinuous Galerkin methods for a generalized system of strongly coupled nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, **99** (2021) 105836. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2021.105836>
9. P. Castillo and A. Reyes, Desempeño de algunos métodos de Runge-Kutta en la aproximación numérica de la ecuación lineal de Schrödinger. Aceptado en *Rev. Mex. Fís. E* **64** (2025) 52. <https://doi.org/10.31349/RevMexFisE.64.52>
10. B. Cockburn and B. Dong, An Analysis of the Minimal Dissipation Local Discontinuous Galerkin Method for Convection-Diffusion Problems. *Journal of Scientific Computing*, **32** (2007) 233. <https://doi.org/10.1007/s10915-007-9130-3>
11. B. Cockburn and C.W. Shu, The Local Discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems. *SIAM J. Num. Anal.* **35** (1998) 2440. <https://doi.org/10.1137/S0036142997316712>
12. B. Ehle, A-stable methods and Padé approximations to the exponential. *SIAM. J. Math. Anal.* **4** (1973) 671. <https://doi.org/10.1137/0504057>
13. D.J. Griffiths and D.F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics. Third Ed. Cambridge University Press, (2018). <https://doi.org/10.1017/9781316995433>
14. A. Goldberg, H.M. Schey and J.L. Schwartz, Computer-generated motion pictures of one dimensional quantum mechanical transmission and reflection phenomena. *Am. J. of Phys.* **35** (1967) 177. <https://doi.org/10.1119/1.1973991>
15. J. Hong, L. Ji and Z. Liu, Optimal error estimate of conservative local discontinuous Galerkin method for nonlinear Schrödinger equation. *Applied Numerical Mathematics* **127** (2018) 164. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2018.01.004>
16. I.V. Puzynin, A.V. Selin and S.I. Vinitsky, A high-order accuracy method for numerical solving of the time-dependent Schrödinger equation. *Computer Physics Communications*, **123** (1999) 1. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(99\)00224-6](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(99)00224-6)
17. E.B. Saff and R.S. Varga, On the Zeros and Poles of Padé Approximants to e^z . III *Numerische Mathematik* **30** (1978) 241. <https://doi.org/10.1007/BF01411842>
18. J. R. Shewchuk, Triangle: Engineering a 2D Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator. In: Lin, M.C., Manocha, D. (eds) Applied Computational Geometry Towards Geometric Engineering. *Lecture Notes in Computer Science* **1148** (1996) 203. Springer, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/BFb0014497>
19. H. Shao and Z. Wang, Numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation: reduction of the error due to space discretization. *Phys. Rev. E* **79** (2009) 056705. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.056705>

20. L.I. Schiff, Quantum Mechanics, 3rd Ed. International Student Edition. *McGraw-Hill* (1968). <https://doi.org/10.1007/BF01411842>
21. W. van Dijk and F.M. Toyama, Accurate numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation. *Phys. Rev. E* **75** (2007) 036707. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.036707>
22. R.S. Varga, On higher order stable implicit methods for solving parabolic partial differential equations. *J. Mathematical and Physics*, **40** (1961) 220. <https://doi.org/10.1002/sapm1961401220>
23. Y. Xu and C-W. Shu, Local discontinuous Galerkin methods for nonlinear Schrödinger equations. *Journal of Computational Physics*, **205** (2005) 72. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.11.001>