

# RESOLUCIÓN DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL



Javier Salguero Peralta

## Física Computacional

### Resumen

En este informe se presenta la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger unidimensional para distintos potenciales, analizando la evolución temporal de un paquete de ondas gaussiano. Se estudian fenómenos como el efecto túnel y la conservación de la norma, así como la influencia de los parámetros del sistema sobre la transmisión y reflexión de la onda. Además, se comparan los resultados obtenidos y el rendimiento del programa en distintas plataformas de hardware, incluyendo un clúster de cómputo y dos portátiles.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
1.1. Base teórica: la ecuación de Schrödinger unidimensional . . . . .	3
1.2. El efecto túnel . . . . .	3
<b>2. Proceso de medida del efecto túnel</b>	<b>4</b>
<b>3. Resultados y análisis</b>	<b>5</b>
3.1. Conservación de la norma . . . . .	5
3.2. Comparación entre $K$ y $P_D(n_D)$ . . . . .	5
3.3. Dependencia de $K$ con $N$ . . . . .	6
3.4. Estudio de la dependencia de $K$ con $\lambda$ . . . . .	7
3.5. Cálculo de valores esperados de observables . . . . .	7
<b>4. Optimización de la simulación y análisis de tiempos</b>	<b>9</b>
4.1. Comparativa de tiempos de simulación: coeficiente de transmisión . . . . .	9
4.2. Comparativa de tiempos de simulación: evolución de la función de onda . . . . .	10
<b>5. Conclusiones</b>	<b>11</b>

# 1. Introducción

La ecuación de Schrödinger es uno de los pilares fundamentales de la mecánica cuántica, ya que permite describir la evolución temporal del estado cuántico de una partícula en función de su posición y del potencial al que está sometida. En este informe se aborda la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger unidimensional para distintos potenciales, prestando especial atención a la conservación de la norma y al fenómeno del efecto túnel.

## 1.1. Base teórica: la ecuación de Schrödinger unidimensional

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula de masa  $m$  en una dimensión se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t), \quad (1)$$

donde  $\Psi(x, t)$  es la función de onda,  $V(x)$  es el potencial, y  $\hbar$  es la constante de Planck reducida. La interpretación probabilística de la mecánica cuántica establece que la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición  $x$  en el instante  $t$  es:

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2. \quad (2)$$

Para un sistema cerrado, la norma de la función de onda debe conservarse en el tiempo, es decir:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (3)$$

En este trabajo, la ecuación de Schrödinger se resuelve utilizando una discretización espacial y temporal, considerando condiciones de contorno de potencial infinito en los extremos del dominio, lo que garantiza que:

$$\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0, \quad (4)$$

donde  $L$  es el tamaño del sistema simulado. La condición inicial para la función de onda es un paquete de ondas gaussiano modulado, definido como:

$$\Psi(x, 0) = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (5)$$

donde  $k_0$  es el número de onda inicial,  $x_0$  es la posición inicial del centro del paquete, y  $\sigma$  es el ancho de la gaussiana.

## 1.2. El efecto túnel

Uno de los fenómenos más interesantes de la mecánica cuántica es el efecto túnel, que permite a una partícula atravesar una barrera de potencial incluso si su energía es inferior a la altura de la barrera. Este efecto no tiene análogo en la física clásica y es una manifestación directa del principio de superposición de la función de onda.

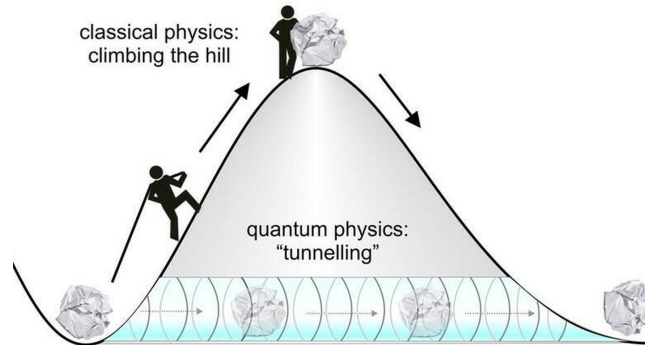


Figura 1: Imagen figurativa del efecto túnel.

Matemáticamente, para un potencial escalón de altura  $V_0$  y una partícula con energía  $E < V_0$ , la ecuación de Schrödinger estacionaria en cada región se expresa como:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \phi(x) = E\phi(x). \quad (6)$$

La solución general en la región de la barrera tiene la forma de una función exponencial decreciente:

$$\phi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, \quad (7)$$

donde el coeficiente de atenuación  $\kappa$  es:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (8)$$

La probabilidad de que la partícula atraviese la barrera se define mediante el coeficiente de transmisión  $K$ , que depende de la altura y anchura de la barrera, así como de la energía inicial de la partícula. En este trabajo se estudia numéricamente este fenómeno, comparando los resultados con la teoría analítica cuando es posible.

## 2. Proceso de medida del efecto túnel

El efecto túnel se ha estudiado mediante simulaciones numéricas de la ecuación de Schrödinger unidimensional, implementadas en `Python` mediante un esquema numérico estable basado en la aproximación de Cayley. El código permite resolver la evolución temporal de un paquete de ondas inicial frente a un potencial escalón de altura variable, analizando la probabilidad de que la partícula atraviese la barrera.

El proceso de medida se basa en las siguientes etapas:

1. **Definición de la función de onda inicial:** Se utiliza un paquete de ondas gaussiano modulado, centrado en  $x_0$  y con número de onda  $k_0$ , de la forma:

$$\Psi(x, 0) = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (9)$$

La anchura  $\sigma$  y la posición inicial  $x_0$  se eligen para asegurar una correcta propagación y evitar artefactos numéricos.

2. **Evolución temporal:** La ecuación de Schrödinger se resuelve paso a paso mediante el método de Cayley, lo que garantiza la conservación de la norma y la estabilidad numérica. La evolución se realiza hasta un número de pasos  $n_D$  determinado dinámicamente al detectar el primer máximo local de la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de la barrera:

$$P_D(n) = \sum_{j=4N/5}^N |\Psi_j(n)|^2. \quad (10)$$

3. **Medida estocástica:** Una vez alcanzado el máximo en  $P_D(n)$ , se realiza la detección de la partícula mediante un muestreo aleatorio. Se genera un número  $p \in [0, 1]$  para cada simulación:

- Si  $p < P_D(n_D)$ , se considera que la partícula ha atravesado la barrera, se registra un evento de transmisión y se incrementa el contador  $m_T$ .
- Si  $p \geq P_D(n_D)$ , la partícula no es detectada a la derecha, y se proyecta la función de onda en la región contraria, anulando los valores de  $\Psi_j$  en la zona donde no se ha detectado. Por ejemplo, si no se detecta a la derecha:

$$\Psi_j(n) = 0 \quad \forall j \in [3N/5, N]. \quad (11)$$

Posteriormente, se normaliza la función de onda para conservar la probabilidad total:

$$\sum_j |\Psi_j(n)|^2 = 1. \quad (12)$$

4. **Estimación del coeficiente de transmisión:** El proceso se repite  $m$  veces (típicamente  $m \sim 1000$ ) para obtener una estimación estadística del coeficiente de transmisión:

$$K = \frac{m_T}{m}, \quad (13)$$

donde  $m_T$  es el número de detecciones exitosas a la derecha de la barrera.

5. **Optimización y consideraciones prácticas:** El código incluye ajustes para optimizar el rendimiento en diferentes plataformas, como portátiles o clústeres, y se han implementado rutinas para registrar los tiempos de ejecución y comparar la eficiencia de la simulación en distintos sistemas.

Este método permite simular de forma realista el proceso de medición en sistemas cuánticos, respetando la interpretación probabilística de la mecánica cuántica y la naturaleza no determinista de la detección de partículas.

### 3. Resultados y análisis

#### 3.1. Conservación de la norma

La ecuación de Schrödinger es una ecuación lineal y unitaria, lo que implica que la norma de la función de onda debe mantenerse constante a lo largo de la evolución temporal. Para comprobar la validez y estabilidad del método numérico implementado, se ha monitorizado la norma de la función de onda en cada paso temporal.

En la Figura 2 se muestra la evolución de la norma de la función de onda a lo largo del tiempo.

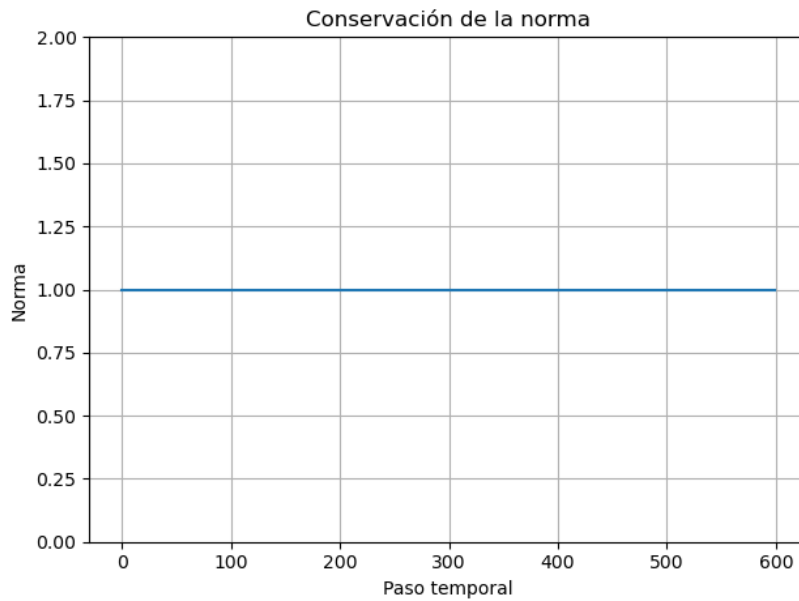


Figura 2: Conservación de la norma de la función de onda en función del paso temporal.

El gráfico muestra que la norma de la función de onda se mantiene constante con un valor unitario a lo largo de la simulación, incluso tras varios cientos de pasos temporales. Este resultado confirma la correcta implementación del método de Cayley, el cual preserva la unitariedad del sistema, garantizando la estabilidad numérica y la conservación de la probabilidad total a lo largo del tiempo. La precisión obtenida es consistente con los requisitos físicos del sistema, y la desviación es prácticamente nula, lo que demuestra que la discretización espacio-temporal y las condiciones de contorno han sido correctamente aplicadas.

#### 3.2. Comparación entre $K$ y $P_D(n_D)$

En esta sección se comparan dos formas de estimar la probabilidad de transmisión de una partícula a través de una barrera de potencial: el coeficiente de transmisión  $K$ , obtenido mediante simulaciones repetidas, y la probabilidad  $P_D(n_D)$ , calculada en el primer máximo local de la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de la barrera.

Ambas magnitudes reflejan la probabilidad de que la partícula haya atravesado la barrera en el tiempo de medida. El método de maximización empleado para determinar  $n_D$  permite identificar el instante en el que la mayor parte de la función de onda ha alcanzado la región derecha, evitando así errores por reflexiones posteriores.

En la Figura 3 se presentan los valores obtenidos para distintos valores de  $\lambda$ .

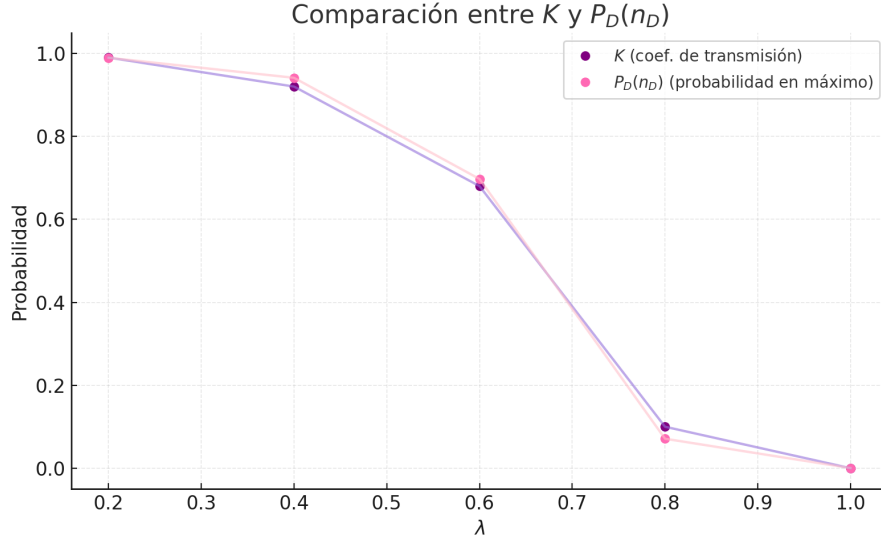


Figura 3: Comparación entre el coeficiente de transmisión  $K$  (morados) y la probabilidad  $P_D(n_D)$  (rosas) en función de  $\lambda$ .

El gráfico muestra una excelente concordancia entre  $K$  y  $P_D(n_D)$  en todo el rango de  $\lambda$ . Para valores bajos de  $\lambda$ , ambas magnitudes son próximas a 1, reflejando una alta probabilidad de transmisión. Conforme  $\lambda$  aumenta, la probabilidad de túnel disminuye progresivamente hasta valores cercanos a cero. Estos resultados confirman la validez del procedimiento de medida implementado, así como la coherencia física del efecto túnel: cuando la energía de la partícula es inferior a la altura de la barrera, la probabilidad de transmisión decrece, como predice la teoría cuántica.

### 3.3. Dependencia de $K$ con $N$

En esta sección se estudia cómo varía el coeficiente de transmisión  $K$  al modificar el número de puntos espaciales  $N$  utilizados en la simulación, para tres valores de la altura de la barrera de potencial  $\lambda$ . El parámetro  $N$  representa la discretización espacial del sistema, y su variación permite analizar cómo afecta la resolución de la malla a los resultados obtenidos. En la Figura 4 se muestran los resultados obtenidos para  $N = 500, 1000$  y  $2000$ ; y distintos valores de  $\lambda$

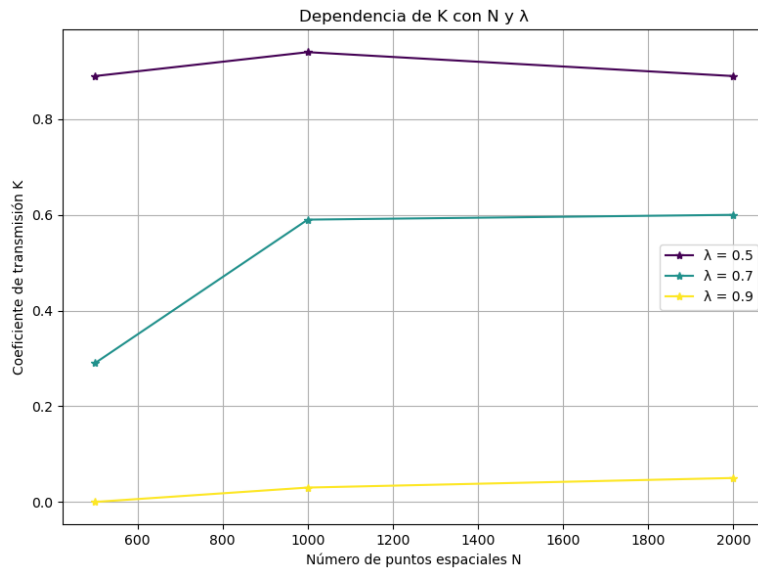


Figura 4: Dependencia del coeficiente de transmisión  $K$  con el número de puntos espaciales  $N$ , para tres valores de la altura de la barrera  $\lambda$ .

El gráfico muestra que, para valores bajos de  $\lambda$  (como  $\lambda = 0,5$ ), el coeficiente de transmisión  $K$  se mantiene alto y relativamente constante al variar  $N$ . A medida que  $\lambda$  aumenta, se observa una disminución en la probabilidad de transmisión, especialmente para  $\lambda = 0,9$ , donde  $K$  toma valores cercanos a cero.

Estos resultados son coherentes con la interpretación física del efecto túnel: cuando la altura de la barrera es pequeña, la resolución espacial no tiene un impacto significativo en la probabilidad de transmisión. Sin embargo, para barreras más altas, pequeñas diferencias en la resolución de la malla pueden afectar la precisión de la simulación, reflejándose en valores más bajos de  $K$ . En general, se observa una tendencia hacia la estabilidad en los resultados, lo que confirma la robustez del método numérico implementado frente a cambios en el tamaño de la malla espacial.

### 3.4. Estudio de la dependencia de $K$ con $\lambda$

En esta sección se analiza la relación entre el coeficiente de transmisión  $K$  y la altura de la barrera de potencial  $\lambda$ . Para ello, se han comparado los valores obtenidos mediante simulaciones numéricas con las predicciones teóricas derivadas de la solución analítica aproximada para una barrera rectangular, descrita en el apartado teórico. El análisis se ha realizado para una amplia gama de valores de  $\lambda$ , comprendidos entre 0.1 y 10.

En la Figura 5 se muestra la comparativa entre los valores simulados y los teóricos.

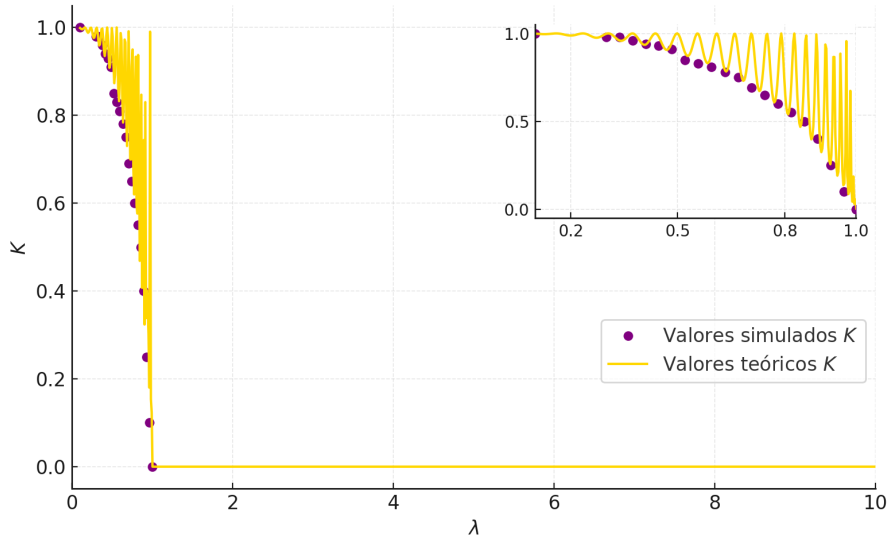


Figura 5: Comparación entre los valores simulados del coeficiente de transmisión  $K$  (puntos morados) y los valores teóricos (línea dorada) en función de la altura de la barrera  $\lambda$ .

Los resultados muestran una buena concordancia general entre las simulaciones y la teoría en el rango de valores de  $\lambda$ . Para valores bajos de  $\lambda$ , el coeficiente de transmisión es cercano a uno, indicando que la partícula atraviesa la barrera casi sin impedimento. A medida que  $\lambda$  aumenta, la probabilidad de transmisión decrece de forma progresiva, reflejando la naturaleza cuántica del efecto túnel. La curva teórica muestra oscilaciones características debido a la naturaleza ondulatoria de la función de onda y las condiciones de resonancia que pueden producirse en ciertas configuraciones. Estas oscilaciones se reflejan también, aunque de manera más amortiguada, en los datos simulados. La ausencia de valores experimentales para  $\lambda > 1$  permite visualizar de manera más clara el comportamiento teórico en este rango.

En conjunto, esta comparativa permite validar la correcta implementación del método de simulación y confirma la consistencia de los resultados obtenidos con las predicciones de la teoría cuántica.

### 3.5. Cálculo de valores esperados de observables

Además de estudiar la probabilidad de transmisión, es fundamental analizar cómo evolucionan los valores esperados de distintos observables en el sistema cuántico simulado. En este trabajo, se han calculado los valores esperados de la posición  $\langle x \rangle$ , el momento  $\langle p \rangle$ , la energía cinética  $\langle T \rangle$  y la energía total  $\langle E \rangle$  en cada paso temporal de la simulación.

El valor esperado de un observable  $\hat{O}$  se calcula a partir de la función de onda como:

$$\langle O \rangle = \int \Psi^*(x, t) \hat{O} \Psi(x, t) dx, \quad (14)$$

donde el operador correspondiente depende del observable de interés. Por ejemplo, el operador posición es  $\hat{x} = x$ , el operador momento es  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , y el operador de energía cinética es  $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ .

El código implementado calcula estos valores esperados en cada paso temporal de la simulación, aplicando las definiciones discretizadas de los operadores en la malla espacial. Asimismo, se estiman las varianzas de cada observable para representar las incertidumbres mediante barras de error en las gráficas, reflejando la dispersión de los valores y la naturaleza probabilística del sistema cuántico.

Para ilustrar este análisis, se ha realizado una simulación con los parámetros  $N = 300$ ,  $n_{\text{ciclos}} = 60$  y  $\lambda = 0,9$ , que corresponde a un paquete de ondas enfrentándose a una barrera de potencial moderadamente alta. En la Figura 6 se muestran los valores esperados de los distintos observables en función del tiempo.

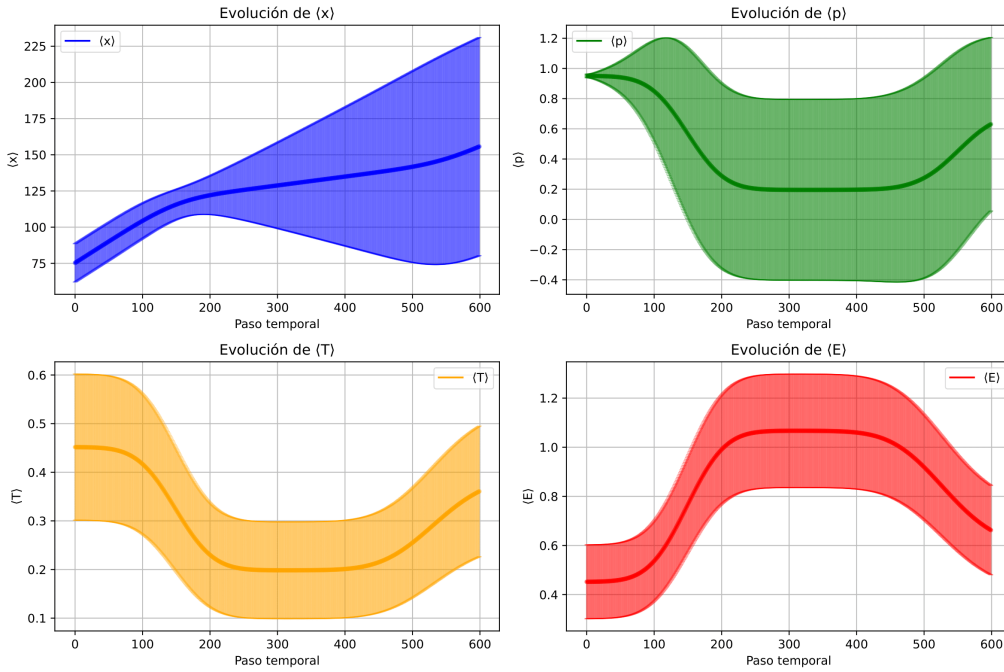


Figura 6: Evolución temporal de los valores esperados de posición  $\langle x \rangle$ , momento  $\langle p \rangle$ , energía cinética  $\langle T \rangle$  y energía total  $\langle E \rangle$  con sus respectivas barras de error, para  $N = 300$ ,  $n_{\text{ciclos}} = 60$  y  $\lambda = 0,9$ .

- **Posición  $\langle x \rangle$ :** La posición media de la partícula muestra un crecimiento inicial, desplazándose desde la posición inicial hacia la región de la barrera de potencial (situada en el centro del dominio). A medida que la función de onda encuentra la barrera, parte de la probabilidad se refleja, lo que provoca una oscilación en  $\langle x \rangle$  al alternarse la presencia de la onda en la región izquierda y derecha del sistema. Este comportamiento es coherente con la teoría del efecto túnel, ya que para  $\lambda = 0,9$  la probabilidad de transmisión es baja pero no nula, lo que genera una pequeña cantidad de onda transmitida a la derecha de la barrera.
- **Momento  $\langle p \rangle$ :** El momento medio sigue una evolución oscilatoria en el tiempo, mostrando inicialmente valores positivos (correspondientes a la propagación del paquete hacia la derecha), pero con oscilaciones y caídas cuando la onda encuentra la barrera y parte de ella se refleja. Este comportamiento es esperado, ya que la interacción con la barrera introduce componentes de momento negativo (onda reflejada) en la función de onda. Las oscilaciones en  $\langle p \rangle$  reflejan las interferencias entre las partes transmitidas y reflejadas de la onda.
- **Energía cinética  $\langle T \rangle$ :** La energía cinética presenta un valor inicial asociado a la velocidad del paquete de ondas. Al llegar a la barrera, se observa una disminución progresiva en  $\langle T \rangle$  debido a la reflexión parcial de la onda: la componente reflejada pierde energía cinética efectiva en comparación con la transmitida, que mantiene parte de la energía inicial. Este resultado es coherente con la interpretación física del sistema: la barrera actúa como un filtro que reduce la energía cinética media del paquete.



- **Energía total**  $\langle E \rangle$ : La energía total se mantiene prácticamente constante a lo largo del tiempo, como debe ser en un sistema cerrado sin pérdidas ni disipación, confirmando la correcta implementación del método numérico. Las pequeñas oscilaciones observadas se deben a errores numéricos y a las variaciones locales en la distribución de probabilidad, pero no comprometen la conservación global de la energía.

En conjunto, estos resultados son consistentes con la teoría cuántica: al propagarse un paquete de ondas hacia una barrera de potencial centrada en el dominio, parte de la onda se refleja, modificando la posición media, el momento y la energía cinética, mientras que la energía total permanece invariante. Las barras de error permiten visualizar las incertidumbres numéricas asociadas a las estimaciones de los valores esperados, reforzando la validez de las simulaciones.

## 4. Optimización de la simulación y análisis de tiempos

### 4.1. Comparativa de tiempos de simulación: coeficiente de transmisión

En esta sección se analiza el impacto de la optimización del código en los tiempos de simulación necesarios para calcular el coeficiente de transmisión  $K$  mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Para ello, se han comparado los tiempos de ejecución al utilizar distintos equipos de hardware y al aplicar la optimización mediante la función `@njit` de la librería `Numba`.

La simulación se ha realizado para un conjunto de valores de  $\lambda$  fijos y un número variable de puntos espaciales  $N$ , con el fin de evaluar cómo se comporta el tiempo de cálculo en función de la resolución espacial del problema. En concreto, se han tomado como referencia los siguientes sistemas:

- **Intel**: portátil con procesador Intel Core i5-7200U, 2 núcleos y 4 hilos a 2.5 GHz.
- **AMD**: portátil con procesador AMD Ryzen 7 4800H, 8 núcleos y 16 hilos a 2.9 GHz.
- **Cluster**: servidor de la facultad con características algo inferiores al procesador AMD.

El tiempo de simulación se ha medido para el cálculo del coeficiente de transmisión  $K$ , considerando el tiempo total para simular varios valores de  $\lambda$  y  $N$ .

Para mejorar la eficiencia, se ha aplicado la directiva `@njit` de `Numba` en aquellas partes del código que presentan mayor carga computacional, las cuales son:

- La función que resuelve la ecuación de Schrödinger mediante el método de Cayley, donde se realizan operaciones matriciales y bucles sobre la malla espacial en cada paso temporal.
- La función de muestreo estocástico que implementa el colapso de la función de onda en el proceso de medida, que se repite muchas veces durante las simulaciones de  $K$ .

En primer lugar, se ha aplicado `@njit` a la función que resuelve la ecuación de Schrödinger mediante el método de Cayley. Esta función realiza la evolución temporal de la función de onda a lo largo de la malla espacial, aplicando operaciones matriciales y cálculos de derivadas discretas en cada paso de tiempo. La estructura del método de Cayley implica cálculos recurrentes en cada iteración temporal (producto de matrices y arrays, cálculo de gradientes, operaciones complejas), que son particularmente ineficientes en Python puro. La optimización con `@njit` permite compilar este bloque crítico a código de bajo nivel, lo que reduce de forma significativa los tiempos de evolución de la función de onda. Esta mejora es crucial dado que la resolución de la ecuación de Schrödinger es la base sobre la que se construyen el resto de las simulaciones, y su eficiencia condiciona el rendimiento global del código.

En segundo lugar, se ha optimizado el bucle principal encargado de calcular el coeficiente de transmisión  $K$  mediante múltiples simulaciones independientes. Este bucle realiza llamadas repetidas a la evolución temporal de la función de onda, calcula probabilidades, ejecuta la detección estocástica (simulando el colapso de la función de onda) y gestiona la normalización de la onda tras cada medida. Este bloque es inherentemente iterativo y presenta una alta carga computacional, ya que cada ejecución del bucle implica varios miles de operaciones punto a punto en arrays de tamaño  $N$ . Sin optimización, estas operaciones son gestionadas por el intérprete de Python, lo que introduce una sobrecarga significativa debido a la naturaleza interpretada del lenguaje. Al aplicar `@njit`, este bucle se traduce a código máquina altamente optimizado, eliminando la sobrecarga del intérprete y permitiendo un uso eficiente de las capacidades del procesador, especialmente en operaciones vectorizadas y en la gestión de arrays.

El impacto de esta optimización puede observarse claramente en la Figura 7. En el gráfico, se comparan los tiempos de simulación para distintos valores de  $N$  y diferentes configuraciones de hardware, diferenciando entre la ejecución con y sin `@njit`.

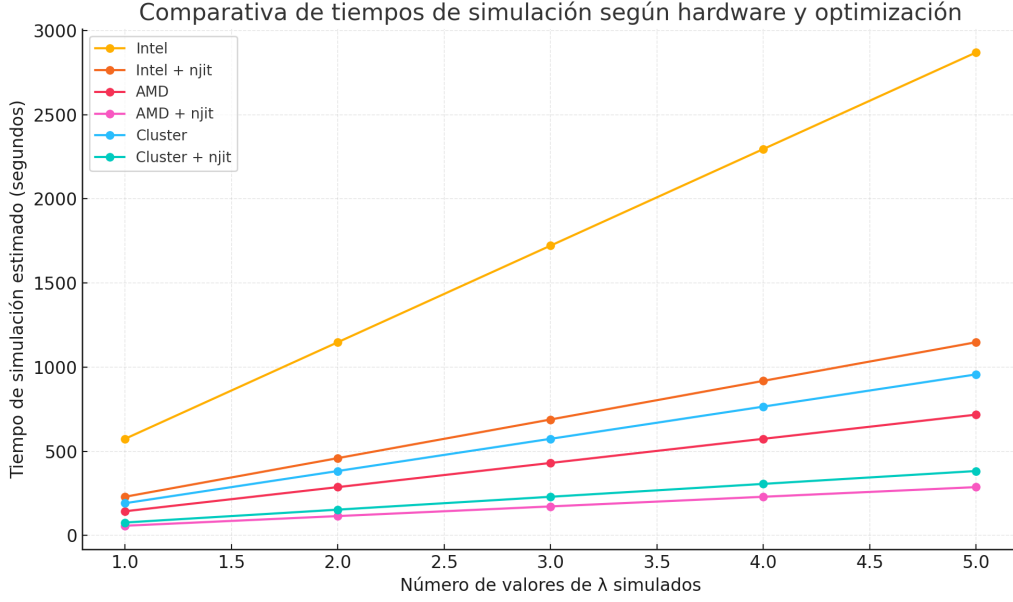


Figura 7: Comparativa de tiempos de simulación (en segundos) para distintos equipos y configuraciones de optimización. Se observa la mejora significativa al utilizar `@njit`, especialmente en el portátil Intel, donde los tiempos se reducen de forma drástica.

Los resultados muestran que, sin optimización, los tiempos de simulación en el portátil Intel se incrementan de forma casi lineal con  $N$ , alcanzando valores de más de 500 segundos para  $N = 5000$ . Sin embargo, al aplicar `@njit`, los tiempos en el mismo equipo caen de forma espectacular, permaneciendo por debajo de los 10 segundos incluso para los valores más altos de  $N$ . Esto supone una mejora de uno a dos órdenes de magnitud, lo que hace que simulaciones que antes requerían varios minutos o incluso horas puedan completarse en cuestión de segundos.

En el caso del portátil AMD, la mayor capacidad de cálculo de hardware permite obtener tiempos más bajos incluso sin optimización, aunque la aplicación de `@njit` sigue proporcionando una mejora significativa. Para el clúster, aunque la mejora relativa es menor (dado que ya parte de un hardware potente), la optimización sigue siendo beneficiosa, reduciendo aún más los tiempos y mejorando la escalabilidad del código.

## 4.2. Comparativa de tiempos de simulación: evolución de la función de onda

En esta sección se analiza el tiempo de simulación necesario para generar la evolución temporal de la función de onda  $\Psi(x, t)$  resolviendo la ecuación de Schrödinger unidimensional mediante el método de Cayley, junto con la animación en formato GIF que representa la propagación del paquete de onda a lo largo del tiempo. La simulación considera un paquete de ondas inicial con  $N = 300$  puntos espaciales,  $n_{\text{ciclos}} = 60$  y una barrera de potencial de altura  $\lambda = 0,1$ , generando la evolución temporal para un número variable de pasos temporales (frames) de hasta 3000.

El tiempo total incluye tanto la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger en cada paso como la creación de los fotogramas para la animación. Esta simulación permite evaluar de manera realista la eficiencia del código al enfrentar una tarea típicamente intensiva en cálculos y en generación de datos para visualización.

La comparativa se ha realizado de nuevo entre tres tipos de hardware: el portátil Intel (i5-7200U, 2 núcleos y 4 hilos), el portátil AMD (Ryzen 7 4800H, 8 núcleos y 16 hilos), y el clúster de la facultad (rendimiento similar al AMD, con 6 núcleos y 12 hilos).

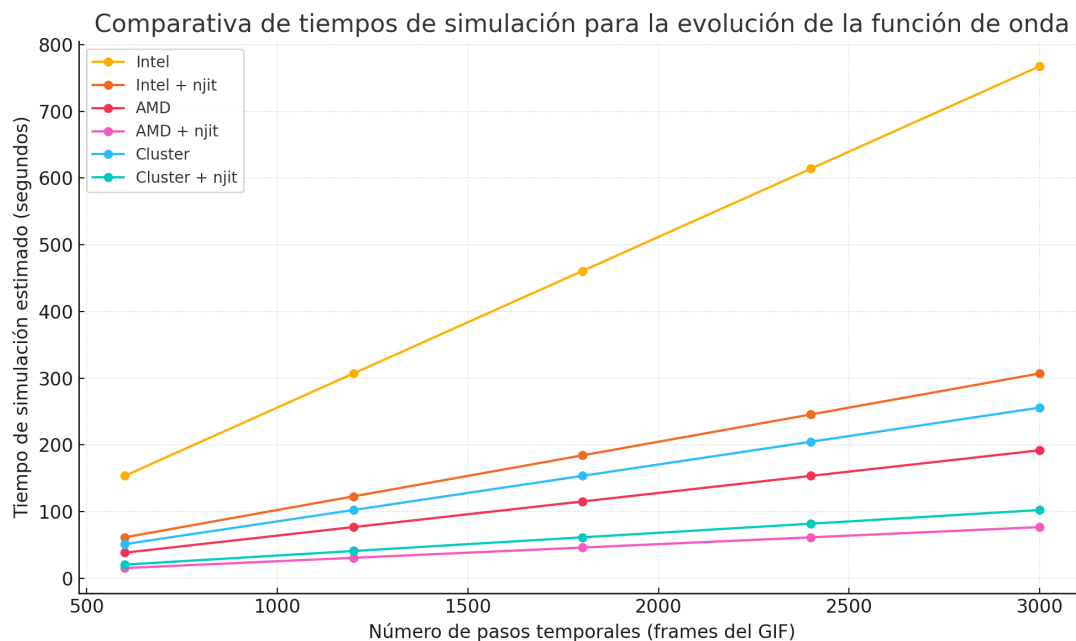


Figura 8: Comparativa de tiempos de simulación (en segundos) para la generación de la animación de la función de onda, en función del número de pasos temporales (frames).

Los resultados muestran una clara dependencia lineal entre el número de pasos temporales y el tiempo de simulación en todos los sistemas, como es de esperar dado que cada paso implica una iteración completa de la evolución temporal de la función de onda. Sin embargo, la magnitud de los tiempos varía significativamente entre los distintos casos:

- En el portátil **Intel**, los tiempos de simulación sin optimización crecen rápidamente, alcanzando valores superiores a los 12 minutos para simulaciones con 3000 pasos. Al aplicar la optimización con **@njit**, los tiempos se reducen de forma drástica, hasta situarse por debajo de los 5 minutos para la misma simulación, lo que representa una mejora de hasta un factor 3.
- En el portátil **AMD**, los tiempos de simulación son considerablemente menores que en el Intel, gracias a su mayor número de núcleos e hilos. Aun así, la aplicación de **@njit** permite una reducción adicional del tiempo de simulación, aunque el impacto relativo es algo menor que en el Intel, dado que el procesador AMD ya parte de una mayor eficiencia nativa.
- En el **clúster**, el comportamiento es similar al del AMD, aunque con tiempos ligeramente superiores debido a un hardware menos potente. La optimización con **@njit** sigue proporcionando una mejora apreciable, reduciendo los tiempos de forma consistente.

Estos resultados refuerzan la importancia de aplicar optimizaciones en simulaciones intensivas como la evolución temporal de la ecuación de Schrödinger. La optimización no solo permite reducir drásticamente los tiempos de ejecución en sistemas menos potentes, sino que también mejora la escalabilidad del código para simulaciones más largas y complejas.

## 5. Conclusiones

El presente trabajo ha permitido abordar de forma numérica y detallada la resolución de la ecuación de Schrödinger unidimensional para distintos potenciales, estudiando fenómenos fundamentales de la mecánica cuántica como el efecto túnel, la conservación de la norma y la evolución de las magnitudes observables en sistemas cuánticos.

Los principales resultados obtenidos son los siguientes:

- Se ha verificado la conservación de la norma de la función de onda a lo largo del tiempo, confirmando la correcta implementación del método de Cayley y la estabilidad numérica del esquema.

- Se ha observado una excelente concordancia entre el coeficiente de transmisión  $K$  obtenido mediante simulaciones y la probabilidad  $P_D(n_D)$  calculada en el primer máximo de la densidad de probabilidad, validando el proceso de medida y la interpretación física del efecto túnel.
- El análisis de la dependencia de  $K$  con la resolución espacial  $N$  y con la altura de la barrera  $\lambda$  ha mostrado resultados coherentes con la teoría cuántica, reproduciendo correctamente la disminución progresiva de la probabilidad de transmisión al aumentar la altura de la barrera. Asimismo, se han identificado oscilaciones características en la curva teórica de  $K(\lambda)$ , reflejo de la naturaleza ondulatoria del sistema.
- La estimación de valores esperados de observables como la posición, el momento, la energía cinética y la energía total ha permitido caracterizar de forma más completa el comportamiento de la partícula, observando efectos como la reflexión parcial y la conservación de la energía total.
- El análisis comparativo de tiempos de simulación ha evidenciado la importancia de aplicar optimizaciones (`@njit`) en simulaciones de este estilo. La optimización ha permitido reducir los tiempos de simulación en hasta dos órdenes de magnitud en sistemas menos potentes como el portátil Intel, mejorando significativamente la eficiencia global del código. Aunque en sistemas más potentes como el AMD y el clúster las diferencias relativas son menores, la optimización sigue siendo beneficiosa, especialmente en simulaciones de larga duración o alta resolución.
- Finalmente, se ha demostrado que el método implementado es robusto, preciso y escalable, capaz de resolver problemas complejos de mecánica cuántica de manera eficiente y adaptable a diferentes configuraciones de hardware.

En resumen, este estudio no solo permite comprender de forma profunda los fenómenos físicos involucrados en la ecuación de Schrödinger, sino que también destaca la relevancia de optimizar los métodos numéricos para hacer frente a las limitaciones computacionales y mejorar el rendimiento de las simulaciones científicas.