

Formalismo Geométrico de la Mecánica Cuántica

Integradores Unitarios



Trabajo de Fin de Grado realizado por
Alfonso Lanuza García

bajo la dirección de
Dr. Jesús Jerónimo Clemente Gallardo
y Dr. José F. Cariñena Marzo

Junio 2016



Universidad
Zaragoza

Apéndice

Apéndice A

Acciones del grupo unitario

En este apéndice, profundizamos en las distintas acciones del grupo unitario, estableciendo una herramienta que relaciona al grupo con las distintas imágenes y formalismos de la mecánica cuántica.

Definición A.0.2. Una *acción (a izquierdas) de un grupo de Lie* G sobre una variedad M es una aplicación diferenciable $\Phi : G \times M \rightarrow M$, que cumple:

i) $\forall p \in M, \Phi(e, p) = p$ donde e es el elemento neutro del grupo.

ii) $\forall p \in M, g, h \in G, \Phi(gh, p) = \Phi(g, \Phi(h, p))$.

Notas A.0.3.

- Estas dos condiciones implican que, para cada elemento g de G , la aplicación $\Phi_g := \Phi(g, \cdot) : M \rightarrow M$ es un difeomorfismo.
- La acción a derechas $\Phi : M \times G \rightarrow M$ se define de manera análoga, sustituyendo las condiciones A.0.2(i) y A.0.2(ii) por
 - i)* $\forall p \in M, \Phi(p, e) = p$.
 - ii)* $\forall p \in M, g, h \in G, \Phi(p, gh) = \Phi(\Phi(p, g), h)$.
- Cuando la variedad diferenciable M tiene una estructura de espacio vectorial, p.e. $M \cong \mathbb{C}^n$, y la aplicación Φ es lineal en su segundo argumento, se dice que es una **representación del grupo** G en el grupo general lineal, $GL(M)$. Su importancia radica en que, en dicho caso, Φ establece un homomorfismo de grupos entre un grupo abstracto G y otro más familiar, $GL(M)$:

$$\begin{aligned} G &\longrightarrow GL(M) \\ g &\longmapsto \Phi(g, \cdot) \end{aligned}$$

A continuación presentamos las distintas acciones de un grupo de Lie matricial $G \subseteq GL(n, \mathbb{C})$: la representación natural Ψ sobre \mathbb{C}^n y la correspondiente acción sobre el proyectivo $\Psi_{\mathbb{P}}$, la representación adjunta Ad sobre el álgebra de Lie \mathfrak{g} y la coadjunta $Coad$ sobre el dual \mathfrak{g}' del álgebra. Y las aplicamos al caso mecano-cuántico $G = U(n)$ para relacionar al grupo con los espacios de trabajo propios de las distintas imágenes de la mecánica cuántica (ver Fig. A.1).

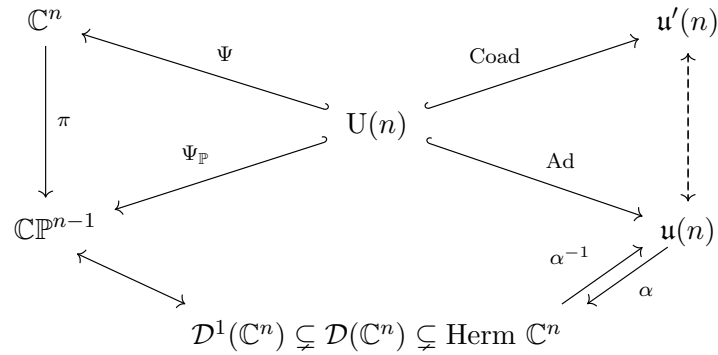


Figura A.1: Diagrama con las acciones del grupo unitario y las estructuras matemáticas que aparecen en los distintos formalismos de la mecánica cuántica. $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ y $\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n)$ están en relación 1-1, así como $\text{Herm } \mathbb{C}^n$ y $\mathfrak{u}(n)$. Por el teorema de Riesz, $\mathfrak{u}(n)$ y $\mathfrak{u}'(n)$ también están en relación biunívoca, pero sólo en el caso de dimensión finita.

A.1. Acción del grupo en la imagen de Schrödinger

Dado que el espacio de trabajo en la imagen de Schrödinger es el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, y que los elementos del grupo unitario $U(n)$ son isomorfismos de este espacio vectorial, la acción de $U(n)$ en \mathbb{C}^n es trivial:

$$\begin{aligned} \Psi : U(n) \times \mathbb{C}^n &\longrightarrow \mathbb{C}^n \\ (U, |\psi\rangle) &\longmapsto U |\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

A esta acción se le denomina *representación natural* del grupo matricial, ya que cada $U \in U(n)$ queda representado por $\Psi_U = U$. La imagen de Schrödinger consiste en usar la representación natural para desplazar al espacio de Hilbert la evolución dinámica del sistema:

$$|\psi(t)\rangle := U(t) |\psi(0)\rangle \quad (\text{A.2})$$

Combinando Ec. (A.2) con la Ecuación (2.18), se obtiene la evolución de los elementos del espacio de Hilbert:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -iH |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.3})$$

Ésta, es la conocida como *ecuación de Schrödinger*. Históricamente, su planteamiento supone el nacimiento de la mecánica cuántica y es habitual trabajar con ella.

A.2. Acción del grupo sobre el espacio proyectivo

La representación natural Ψ se puede extender fácilmente a una acción sobre el proyectivo dada por

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbb{P}} : U(n) \times \mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1} &\longrightarrow \mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1} \\ (U, [\psi]) &\longmapsto \pi(U |\psi\rangle). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Esta acción queda bien definida ya que si dos estados $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \hat{\mathbb{C}}^n$ definen el mismo rayo en el espacio de Hilbert (i.e. $[\psi_1] = [\psi_2]$), entonces existe un $\lambda \in \hat{\mathbb{C}}$ tal que $|\psi_1\rangle = \lambda |\psi_2\rangle$, luego para cada $U \in U(n)$

$$\Psi_{\mathbb{P}}(U, [\psi_1]) = \pi(U |\psi_1\rangle) = \pi(U(\lambda |\psi_2\rangle)) = \pi(\lambda U |\psi_2\rangle) = \pi(U |\psi_2\rangle) = \Psi_{\mathbb{P}}(U, [\psi_2]). \quad (\text{A.5})$$

A.3. Acción del grupo en la imagen de Heisenberg

En todo grupo de Lie G existen acciones naturales del grupo en sí mismo. Las más conocidas son obtenidas por la multiplicación por la izquierda $L_g : G \rightarrow G$, $L_g(g') = gg'$ y por la derecha $R_g : G \rightarrow G$, $R_g(g') = g'g \quad \forall g, g' \in G$; ya que se corresponden con los ejemplos más evidentes de acciones a izquierdas y a derechas, respectivamente. Pero éstas también se pueden combinar formando otras, como la acción por automorfismos internos $L_g \circ R_{g^{-1}} = R_{g^{-1}} \circ L_g = i_g$,

$$\begin{aligned} i_g : G &\longrightarrow G \\ g' &\longmapsto gg'g^{-1}. \end{aligned} \tag{A.6}$$

Como el espacio tangente a G queda identificado con el álgebra de Lie \mathfrak{g} asociada, se define la *representación adjunta* de G como $\text{Ad}_g = (i_g)_*$. Para el caso de grupos de Lie matriciales, la representación adjunta viene dada por

$$\begin{aligned} \text{Ad} : G \times \mathfrak{g} &\longrightarrow \mathfrak{g} \\ (g, X) &\longmapsto gXg^{-1}. \end{aligned} \tag{A.7}$$

En la imagen de Heisenberg de la mecánica cuántica, la evolución dinámica del sistema se asocia al espacio de observables $\mathcal{O} = \text{Herm } \mathbb{C}^n$, mientras el estado del sistema permanece constante. Usando la versión a derechas de la representación adjunta del grupo $U(n)$, y la identificación de $\mathfrak{u}(n)$ con $\text{Herm } \mathbb{C}^n$ (Ec. (2.5)), se obtiene la acción

$$\begin{aligned} U(n) \times \text{Herm } \mathbb{C}^n &\longrightarrow \text{Herm } \mathbb{C}^n \\ (U, A) &\longmapsto U^\dagger AU \end{aligned} \tag{A.8}$$

en la imagen de Heisenberg. Diferenciando ésta y usando la Ecuación (2.18), se obtiene la *ecuación de Heisenberg*

$$\frac{d}{dt}A(t) = -i[H(t), A(t)] = [H(t), A(t)]_- \tag{A.9}$$

que determina la evolución dinámica de un observable $A(t) := U^\dagger(t)AU(t)$.

A.4. Acción del grupo sobre el conjunto de matrices densidad

A partir de la representación adjunta del grupo de Lie G , se define la *representación coadjunta*

$$\begin{aligned} \text{Coad} : G \times \mathfrak{g}' &\longrightarrow \mathfrak{g}' \\ (g, L) &\longmapsto \text{Coad}_g L \end{aligned} \tag{A.10}$$

del grupo sobre el dual de su álgebra de Lie, donde $\text{Coad}_g L$ viene definido por

$$\text{Coad}_g L(X) = L(\text{Ad}_{g^{-1}} X) \quad \forall X \in \mathfrak{g}, \tag{A.11}$$

y el criterio usado para aplicar $\text{Ad}_{g^{-1}}$ en vez de Ad_g es que la acción siga siendo a izquierdas.¹

En nuestro caso práctico ($G = U(n)$), la identificación entre los conjuntos $\mathfrak{u}(n)$ y $\text{Herm } \mathbb{C}^n$ permite identificar también espacios sus duales, $\mathfrak{u}'(n)$ y $(\text{Herm } \mathbb{C}^n)'$. Como, en dimensión finita, la traza del producto de operadores hermíticos define un producto escalar en $\text{Herm } \mathbb{C}^n$, por el *teorema de representación de Riesz* cada elemento de $(\text{Herm } \mathbb{C}^n)'$ se puede representar como

¹Sin embargo, para pasar de la Ecuación (A.8) a la Ecuación (A.17) no se sigue este criterio.

$\text{Tr}(\rho \cdot)$ para algún $\rho \in \text{Herm } \mathbb{C}^n$. Esta biyectividad no es cierta, sin embargo, cuando el espacio de Hilbert \mathcal{H} es de dimensión infinita, en cuyo caso ρ debe ser un *operador de clase traza*, los cuales constituyen un ideal bilátero de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ al que no pertenece, por ejemplo, el operador identidad.

Para entender la importancia del espacio $(\text{Herm } \mathbb{C}^n)'$ en física cuántica, basta recordar que la medición de un observable $A \in \text{Herm } \mathbb{C}^n$ viene dado por su *valor esperado* (Ec. (1.3)), el cual es un funcional lineal en \mathcal{O} y por tanto pertenece a \mathcal{O}' . En 1927, John von Neumann estudió qué condiciones debe satisfacer una '*matriz de densidad*' $\rho \in \text{Herm } \mathbb{C}^n$ para que el *valor esperado*, calculado como

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr}(\rho A) \in \mathbb{R} \quad \forall A \in \text{Herm } \mathbb{C}^n, \quad (\text{A.12})$$

ofrezca valores realistas. La conclusión a la que llegó, es que el *conjunto de matrices de densidad* viene dado por

$$\mathcal{D}(\mathbb{C}^n) = \{\rho \in \text{Herm } \mathbb{C}^n \mid \text{Tr}(\rho) = 1, \rho \geq 0\}, \quad (\text{A.13})$$

esto es, que deben ser matrices de traza unidad y semidefinidas positivas.

Con esto, von Neumann pudo generalizar la mecánica cuántica al trabajar con el mismo espacio de observables $\mathcal{O} = \text{Herm } \mathbb{C}^n$ pero con las matrices de densidad como conjunto de estados $\mathcal{S} = \mathcal{D}(\mathbb{C}^n)$. La relación entre un estado en el formalismo de Schrödinger $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^n$ y un estado en este nuevo formalismo, viene dado por el proyector ortogonal sobre el rayo complejo $[\psi]$, que se suele denotar en notación *bra-ket* como

$$\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} \in \mathcal{D}(\mathbb{C}^n). \quad (\text{A.14})$$

Es sencillo comprobar que este proyector conduce a los mismos valores esperados que $|\psi\rangle$, i.e.

$$\frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \text{Tr}\left(\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}A\right) \quad \forall A \in \text{Herm } \mathbb{C}^n, \quad (\text{A.15})$$

cuando la traza se calcula en una base ortonormal que contenga al vector $\|\psi\|^{-1}|\psi\rangle \in \mathbb{C}^n$. Así, cada rayo $[\psi] \in \mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ define una matriz de densidad a partir del proyector ortogonal sobre el haz, pero no toda matriz de densidad es un proyector ortogonal de rango 1. Al subconjunto de estos proyectores,

$$\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n) = \{\rho \in \mathcal{D}(\mathbb{C}^n) \mid \rho^2 = \rho\} \subsetneq \mathcal{D}(\mathbb{C}^n), \quad (\text{A.16})$$

se le denomina *conjunto de estados puros* por estar en relación biunívoca con los haces de $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$. Para ver que $\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n) \neq \mathcal{D}(\mathbb{C}^n)$, basta observar que $\mathcal{D}(\mathbb{C}^n)$ es un subconjunto convexo de $\text{Herm } \mathbb{C}^n$ mientras que $\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n) \neq \mathcal{D}(\mathbb{C}^n)$ no. De hecho, $\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n)$ es la frontera de $\mathcal{D}(\mathbb{C}^n)$. A los estados de $\mathcal{D}(\mathbb{C}^n) \setminus \mathcal{D}^1(\mathbb{C}^n)$ se les denomina *estados mezcla*, por ser una combinación convexa de estados puros. Y es que el sentido físico que se le da a estos estados es el de una mezcla estadística de muchas partículas en diversos estados cuánticos puros.

La representación coadjunta del grupo $U(n)$ en términos de la matrices de densidad,

$$\begin{aligned} U(n) \times \mathcal{D}(\mathbb{C}^n) &\longrightarrow \mathcal{D}(\mathbb{C}^n) \\ (U, \rho) &\longmapsto U\rho U^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

resulta muy parecida a la acción en la imagen de Heisenberg (Ec. (A.8)). Lo mismo sucede con la ecuación dinámica conocida como *ecuación de von Neumann*,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = i[H(t), \rho(t)] = -[H(t), \rho(t)]_-, \quad (\text{A.18})$$

que describe la evolución temporal atribuida a una matriz de densidad $\rho(t) := U(t)\rho U^\dagger(t)$.

A.5. Acción del grupo sobre la esfera de Bloch

El formalismo de matrices de densidad ofrece una nueva perspectiva del sistema cuántico de dos niveles. Ésta se basa en el hecho de que las matrices de Pauli forman junto con la identidad una base ortogonal $\{I_2, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ de $\text{Herm } \mathbb{C}^2$. Así, definiendo $\vec{x} = (x, y, z)^T$ y $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$, podemos representar cualquier matriz hermítica como la combinación lineal

$$\frac{1}{2}x_0I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x_0 + z & x - iy \\ x + iy & x_0 - z \end{pmatrix} \quad x_0, x, y, z \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.19})$$

El factor $\frac{1}{2}$ se ha añadido para que cuando esto sea una matriz de densidad x, y, z se correspondan con $\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle$ como en el Apartado 1.3. Pero para que esto sea una matriz de densidad, la condición de que su traza valga uno obliga a $x_0 = 1$. Además, como ahora los autovalores de esta matriz son

$$\frac{1 \pm \|\vec{x}\|_2}{2}, \quad (\text{A.20})$$

la condición de ser semidefinida positiva obliga a que $\|\vec{x}\|_2 \leq 1$. Así, queda caracterizado el conjunto de estados

$$\mathcal{D}(\mathbb{C}^2) = \left\{ \frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \in \text{Herm } \mathbb{C}^2 \mid \|\vec{x}\|_2 \leq 1 \right\}. \quad (\text{A.21})$$

Además, para que esta matriz sea un proyector sus autovalores deben ser 1 ó 0, con lo cual

$$\mathcal{D}^1(\mathbb{C}^2) = \left\{ \frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \in \text{Herm } \mathbb{C}^2 \mid \|\vec{x}\|_2 = 1 \right\}. \quad (\text{A.22})$$

Así, los estados mixtos del sistema de dos niveles quedan caracterizados como puntos dentro de la esfera de Bloch, y los estados puros como puntos de su superficie.

Veamos ahora que la acción de un elemento $U \in \text{U}(n)$ del grupo unitario sobre $\mathcal{D}(\mathbb{C}^2)$ (Ec (A.17)), define una transformación

$$\frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x}' \cdot \vec{\sigma} = U \left(\frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \right) U^\dagger \quad (\text{A.23})$$

que es una rotación de la esfera de Bloch.

En primer lugar, como x', y', z' se corresponden con los valores esperados de las matrices de Pauli, tenemos que

$$\begin{cases} x' = \text{Tr} \left(U \left(\frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \right) U^\dagger \sigma_x \right) = \text{Tr} \left(\frac{1}{2}U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger \sigma_x \right) \\ y' = \text{Tr} \left(U \left(\frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \right) U^\dagger \sigma_y \right) = \text{Tr} \left(\frac{1}{2}U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger \sigma_y \right) \\ z' = \text{Tr} \left(U \left(\frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \right) U^\dagger \sigma_z \right) = \text{Tr} \left(\frac{1}{2}U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger \sigma_z \right). \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

Como estas funciones son lineales en \vec{x} , existe una matriz $R \in \text{M}(3, \mathbb{R})$ tal que $\vec{x}' = R\vec{x}$. Reescribimos por tanto Ec. (A.23) como

$$(R\vec{x}) \cdot \vec{\sigma} = U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger. \quad (\text{A.25})$$

Recordando que los autovalores de $1/2(I_2 + \vec{x} \cdot \vec{\sigma})$ son $1/2(1 \pm \|\vec{x}\|_2)$, y que por tanto los de $\vec{x} \cdot \vec{\sigma}$ son $\pm \|\vec{x}\|_2$, se tiene que $(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})^2 = \|\vec{x}\|_2^2 I_2$. Así pues, basta elevar al cuadrado la expresión anterior

$$\|R\vec{x}\|_2^2 I_2 = ((R\vec{x}) \cdot \vec{\sigma})^2 = U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger U(\vec{x} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger = U(\|\vec{x}\|_2^2 I_2)U^\dagger = \|\vec{x}\|_2^2 I_2 \quad (\text{A.26})$$

para darse cuenta de que R preserva la norma, es decir, $R \in O(3)$. Esto asegura que la acción del grupo unitario no saca estados fuera de la esfera de Bloch.

Más aún, como la asociación que estamos estudiando

$$\begin{aligned} U(2) &\longrightarrow O(3) \\ U &\longmapsto R \end{aligned} \tag{A.27}$$

es continua (lo cual se puede deducir a partir de Ec. (A.24)) y asocia a $I_2 \in U(2)$ con $I_3 \in O(3)$, el hecho de que $U(2)$ sea un grupo de Lie conexo implica que la imagen de esta aplicación esté contenida en la componente conexa de $O(3)$ a la que pertenece la matriz identidad. Es decir, $R \in SO(3)$ y por tanto representa en \mathbb{R}^3 una rotación.² El hecho de que la acción del grupo sobre la esfera de Bloch sea una rotación de la misma, asegura la conservación del tensor métrico g_B y de la forma simpléctica ω_B presentados en la Sección 1.3 y con ellos toda su estructura kähleriana.³

²Profundizando más en esta relación entre grupos de Lie, se puede probar que de hecho define un isomorfismo $SO(3) \cong SU(2) \subset U(2)$.

³Nótese por ejemplo, que las expresiones (1.35) de estos tensores en coordenadas polares son independientes de φ , lo que supone que los tensores son invariantes bajo rotaciones en torno al eje z .

Apéndice B

Integración numérica mediante algoritmos de Runge-Kutta

B.1. Métodos Runge-Kutta

Uno de los problemas más habituales al tratar *ecuaciones diferenciales ordinarias*, es el *problema de valor inicial* (PVI)

$$y'(t) = f(t, y(t)) \quad y(t_0) = y_0 \quad (\text{B.1})$$

donde $f : \Omega \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es una función continua, localmente Lipschitz respecto de su segundo argumento y definida en un dominio Ω abierto, y $(t_0, y_0) \in \mathbb{R}$. Por el *teorema de Picard* dicho PVI tiene una única solución.

Definición B.1.1. *Un método de Runge-Kutta (RK) de s pasos para aproximar la solución del PVI (B.1), consiste en aproximar $y(t_n)$ con*

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (\text{B.2})$$

donde $h \in \mathbb{R}$ es el paso de la iteración, y por tanto $t_n = nh \quad \forall n \in \mathbb{N}$. Los coeficientes k_i son términos de colocación intermedios, dados por

$$k_i = f(t_n + hc_i, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \quad i = 1, \dots, s. \quad (\text{B.3})$$

Los coeficientes $a_{ij}, b_i, c_i := \sum_{j=1}^s a_{ij}$ son constantes reales que caracterizan el método.

Como los coeficientes $a_{ij}, b_i, c_i \quad (i, j \in \{1, 2, \dots, s\})$ determinan completamente el método de Runge-Kutta utilizado y sus propiedades, se suelen presentar en forma de *tabla de Butcher* (Ref. [3]):

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} = \begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^T \end{array} \quad (\text{B.4})$$

Nótese que en general el sistema de Ecs. (B.3) puede resultar difícil de resolver, pero si los coeficientes $\{a_{ij}\}_{i \leq j}$ se anulan su solución es directa. En esta situación se dice que *el método RK es explícito*, y los coeficientes nulos $\{a_{ij}\}_{i > j}$ no se añaden en la tabla de Butcher.

Un método de Runge-Kutta se dice *de orden* $\ell \in \mathbb{N}$ cuando el error añadido a la solución en cada paso disminuye como $O(h^{\ell+1})$ al reducir $h \geq 0$, ya que en dicho caso $\|y(t_n) - y_n\|_2 \sim O(h^\ell)$.

Para un paso de iteración h lo suficientemente pequeño, un algoritmo (de orden no nulo) siempre converge, pero puede no converger si la función f es lo suficientemente *dura* y el paso no es suficientemente pequeño. Para dar cuenta de esto, se define el concepto de *A-estabilidad*. Al aplicar el método de Runge-Kutta al PVI test

$$y' = \lambda y \quad y(0) = y_0 \quad (\text{B.5})$$

donde $\lambda, y(t) \in \mathbb{C}$, la solución aproximada toma la forma

$$y_n = (\phi(h\lambda))^n y_0 \quad \text{con} \quad \phi(z) = \frac{\det(\mathbf{I}_s - z\mathbf{A} + z\mathbf{e}\mathbf{b}^T)}{\det(\mathbf{I}_s - z\mathbf{A})} \quad \forall z \in \mathbb{C}, \quad (\text{B.6})$$

donde \mathbf{e} representa un vector de s unos. Sin embargo, la solución exacta es $y(t) = e^{\lambda t} y_0$ y tiende a cero (es estable) cuando $t \rightarrow \infty$ siempre que $\text{Re}\lambda < 0$. Lo más deseable es que la solución aproximada mostrase este mismo comportamiento, por lo que se define la *región de estabilidad* como el conjunto

$$\{z \in \mathbb{C} \mid |\phi(z)| < 1\} \quad (\text{B.7})$$

y se dice que el método es *A-estable* cuando dicha región coincide con la mitad izquierda del plano complejo.

Nótese que en el caso de que el método RK sea explícito, \mathbf{A} es una matriz estrictamente triangular inferior, por lo que $\mathbf{I}_s - z\mathbf{A}$ es triangular inferior y su determinante es el producto de los elementos en su diagonal, que son unos. Así, $\det(\mathbf{I}_s - z\mathbf{A}) = 1$ y en consecuencia $\phi(z) = \det(\mathbf{I}_s - z\mathbf{A} + z\mathbf{e}\mathbf{b}^T)$ es un polinomio en $z \in \mathbb{C}$. Pero al ser $\phi(z)$ un polinomio,

$$|\phi(z)| \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \infty, \quad (\text{B.8})$$

luego la región de estabilidad es acotada y el método no puede ser A-estable. Ésta es la motivación que conduce a investigar métodos Runge-Kutta implícitos, a pesar de ser más difíciles de implementar y por ello menos populares que algunos métodos explícitos, como el *método de Euler* o el *método RK de orden 4* (Tabla B.1).

	Método de Euler	Método RK de orden 4	Regla del trapecio
Orden	1	4	2
Tabla de Butcher	$\begin{array}{c c} 0 & \\ \hline 1 & \end{array}$	$\begin{array}{c ccc} 0 & & & \\ 1/2 & 1/2 & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6 \end{array}$	$\begin{array}{c cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}$
$\phi(z)$	$z + 1$	$\frac{z^4}{24} + \frac{z^3}{6} + \frac{z^2}{2} + z + 1$	$\frac{2+z}{2-z}$
Región de estabilidad			

Tabla B.1: Ejemplos de métodos de Runge-Kutta comunes. El primero, el método explícito de Euler, es el ejemplo más sencillo de integrador RK. El segundo, el método RK (explícito) de orden 4, es el ejemplo más usado en la práctica. El tercero, conocido como *regla del trapecio*, es un método implícito A-estable que suele aplicarse más a problemas de cuadratura. Las regiones de estabilidad se han sombreado en azul, marcando con puntos rojos los ceros complejos de $\phi(z)$ y con puntos azules sus polos. El lector puede advertir la estrecha relación entre el orden del método, su función $\phi(z)$ y el desarrollo de Taylor de la función $\exp(z)$ hasta el mismo orden.

B.2. Métodos de Gauss RK

Los *métodos de Gauss RK* o de *Gauss-Legendre Runge-Kutta* son una clase especial de métodos Runge-Kutta implícitos que se basan en la regla de cuadratura gaussiana.

Definición B.2.1. Una **regla de cuadratura** es un procedimiento de integración numérica que aproxima la integral de una función $f \in \mathcal{C}([-1, 1])$ por una suma pesada de la función evaluada en unos nodos $\{x_i\}_{i=1}^s \subset [-1, 1]$,

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^s w_i f(x_i), \tag{B.9}$$

siendo $\{w_i\}_{i=1}^s$ los pesos de la cuadratura.

Nótese que aunque hemos elegido el intervalo estándar $[-1, 1]$ para definir la regla de cuadratura, ésta se puede readaptar a otro intervalo cerrado mediante una simple traslación y una homotecia en la variable independiente $x \in \mathbb{R}$.

La construcción de reglas de cuadratura precisas es un problema clásico ampliamente estudiado en Análisis Numérico (véase Ref. [7], pp. 239-262). Para caracterizar su precisión, se dice que la cuadratura tiene *grado de precisión* $\ell \in \mathbb{N}$ si ofrece una aproximación exacta (sin error) de la integral de todo polinomio cuyo grado sea menor o igual a ℓ . Esta definición de *grado de precisión* queda justificada por el hecho de que los polinomios forman una familia densa dentro del espacio de funciones continuas sobre un compacto como es $\mathcal{C}([-1, 1])$ (teorema de Weierstrass). Una vez establecidos los nodos $\{x_i\}_{i=1}^s$ de la regla de cuadratura, se pueden calcular los s pesos imponiendo que el grado de precisión de la regla creada sea al menos $s - 1$, obteniéndose que

$$w_i = \int_{-1}^1 \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \quad (i = 1, \dots, s). \tag{B.10}$$

Sin embargo, el grado de precisión $s - 1$ se puede aumentar con una buena elección de nodos. Las fórmulas de cuadratura gaussianas surgen de la búsqueda de una cuadratura de máximo grado de precisión.

Teorema B.2.2. *El grado de precisión de una regla de cuadratura de la forma (B.9) con s nodos, es menor o igual a $2s - 1$. Además, el grado es $2s - 1$ si y sólo si los nodos $\{x_i\}_{i=1}^s \subset [-1, 1]$ coinciden con los s ceros distintos del polinomio de Legendre $P_s(x)$, en cuyo caso regla de cuadratura se denomina de Gauss-Legendre.*

Demostración. Véase Referencia [7], pp. 245-246. □

Los *polinomios de Legendre* $\{P_n(x)\}_{n=0}^\infty$ son la familia de polinomios de grado n creciente

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \dots, P_n(x) = 2^n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \binom{\frac{n+k-1}{2}}{n} x^k, \dots \tag{B.11}$$

Una característica de esta familia de polinomios, íntimamente relacionada con el problema de cuadratura, es que los polinomios de Legendre son ortogonales dos a dos respecto al producto escalar de $L^2([-1, 1])$.¹ Más concretamente,

$$\int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1} \delta_m^n. \tag{B.12}$$

Entre otras, esta ortogonalidad implica que el polinomio de Legendre $P_{n+1}(x)$ tenga $n + 1$ ceros reales y simples en el intervalo $[-1, 1]$, separados por los n ceros de $P_n(x)$ (ver Fig. B.1 y Ref. [7], pp. 228-229).

Para relacionar la regla de cuadratura (B.9) con un método RK, podemos aplicar el *teorema fundamental del cálculo* al PVI (B.1) y usar el cambio de variable $x = 2(t - t_n)/h - 1$, obteniendo

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+h} f(t, y(t))dt = y(t_n) + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 f\left(t_n + h\frac{x+1}{2}, y\left(t_n + h\frac{x+1}{2}\right)\right) dx$$

$$\stackrel{(B.9)}{\approx} y_n + h \sum_{i=1}^s \underbrace{\frac{w_i}{2}}_{b_i} \underbrace{f\left(t_n + h\frac{(x_i+1)}{2}, y\left(t_n + h\frac{(x_i+1)}{2}\right)\right)}_{k_i}. \tag{B.13}$$

Comparando esta expresión con Ecs. (B.2) y (B.3), se pueden identificar los coeficientes $b_i = w_i/2$, $c_i = (x_i + 1)/2$ y relacionar los k_i con la derivada de la función en $y'(t_n + hc_i)$. La

¹Para ver ésta y otras muchas propiedades de los polinomios de Legendre, véase Ref. [7] pp. 230-233.

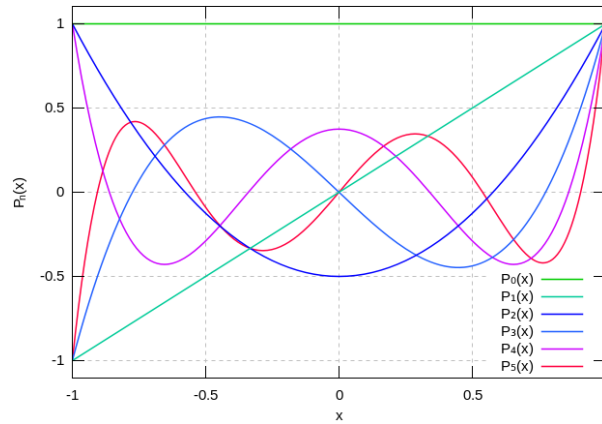


Figura B.1: Seis primeros polinomios $P_n(x)$ de Legendre.

obtención de los coeficientes a_{ij} es más complicada, y se basa en la interpretación del algoritmo RK asociado a la cuadratura como un *método de colocación*. Nótese que, como la fórmula de cuadratura es exacta (al menos) para polinomios de grado $s - 1$, se tiene que

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^s w_i f(x_i) = \int_{-1}^1 \sum_{i=1}^s f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx. \tag{B.14}$$

Es decir, que un método de cuadratura se puede interpretar como la integración del polinomio de interpolación de $f(x)$ en los nodos $\{x_i\}_{i=1}^s$. Un *método de colocación* se construye de un modo similar, aproximando la solución exacta $y(t)$ del PVI en el intervalo $[t_n, t_n + h]$ con el único polinomio $p_s(t)$ de grado s que satisface la condición inicial y la ecuación diferencial sobre los *puntos de colocación* $\{t_n + hc_i\}_{i=1}^s$:

$$\begin{cases} p_s(t_n) = y_n \\ p'_s(t_n + hc_i) = k_i = f(t_n + hc_i, p_s(t_n + hc_i)) \end{cases} \quad (i = 1, \dots, s). \tag{B.15}$$

Este procedimiento permite identificar todos los coeficientes del método RK (incluso los a_{ij}) a partir de los puntos de colocación (Ref. [12], pp. 42-46).

Como cabría esperar, los *métodos de Gauss RK* obtenidos a partir de la cuadratura de Gauss-Legendre tienen muy buenas propiedades. En particular, todo método de Gauss RK basado en s puntos tiene orden $2s$ (Ref. [12], p. 47), siendo éste el máximo posible para un método RK de s pasos, y además es A-estable (Ref. [12], p. 63).

Gauss RK de orden 2	Gauss RK de orden 4	Gauss RK de orden 6
$\begin{array}{c c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$	$\begin{array}{c cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \hline \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$	$\begin{array}{c ccc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} \\ \hline \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array}$

Tabla B.2: Tablas de Butcher de los tres primeros métodos de Gauss Runge-Kutta.