

PROPAGADORES

(1)

(Solução Numérica de Equações Diferenciais)

Considere a seguinte equação diferencial de 1ª ordem:

$$\boxed{\frac{d\psi}{dt} = \hat{L}\psi + f} \quad (1)$$

onde ψ é um vetor: $\psi = \begin{bmatrix} \psi_1(t, \dots) \\ \psi_2(t, \dots) \\ \vdots \\ \psi_N(t, \dots) \end{bmatrix}$

$\hat{L}(t, \frac{\partial}{\partial x}, \dots; x)$ é um operador diferencial, numericamente representado por uma matriz, ou a depender do tipo de problema, é uma matriz de coeficiente.

$f(t, x, \dots)$ é um termo de fonte ou estímulo externo.

t é geralmente o tempo que parametriza a evolução ("propagação") do vetor ψ .

* Para uma função $\Psi(t, x)$, numericamente (2)
temos um vetor com componentes $\Psi_j(t)$

$$\Psi(t, x_j) = \Psi_j(t)$$

$$\Psi(t) = \begin{bmatrix} \Psi_1(t) \\ \Psi_2(t) \\ \vdots \\ \Psi_N(t) \end{bmatrix}$$

No método de diferenças finitas, as derivadas são aproximadas, removendo-se o limite na definição. Por exemplo:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Δx infinitesimal

com Δx finito mas pequeno o suficiente.

Voltemos ao problema (1).

→ Método Explícito em Diferenças finitas:

$$\frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = \overset{\uparrow}{L} \Psi(t, x) + f(t, x) \approx \frac{\Psi(t+\Delta t, x) - \Psi(t, x)}{\Delta t}$$

Obs: x aqui pode ser uma variável espacial ou um conjunto de outras variáveis.

Supondo conhecida a função no instante t , queremos estimar o valor em $t + \Delta t$: (3)

$$\frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\Delta t} = \hat{L} \psi(t, x) + f(t, x)$$

Rearranjando os fatores, após multiplicar a equação por Δt , temos:

$$\psi(t + \Delta t, x) = \psi(t) + \underbrace{\left[\hat{L} \psi(t, x) + f(t, x) \right]}_{\frac{\partial \psi}{\partial t}} \Delta t$$

ou seja, está uma expansão em série de Taylor em 1ª ordem!

$$\psi(t + \Delta t, x) = \psi(t, x) + \left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|_t \cdot \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

O erro é da ordem de $(\Delta t)^2$. Na forma acima, o método numérico explícito de 1ª ordem é conhecido como método de Euler de 1ª ordem. É numericamente INSTÁVEL!!

→ Supondo conhecida a condição inicial $\psi_0(x) = \psi(t=0, x)$ podemos propagar a solução:

1º passo: $t = \Delta t$

$$\psi(\Delta t, x) = \psi_0(x) + \left[\hat{L} \psi_0 + f(0, x) \right] \Delta t$$

2º passo $t = 2\Delta t$

$$\psi(2\Delta t, x) = \psi(\Delta t, x) + \left[\hat{L} \psi(\Delta t, x) + f(\Delta t, x) \right] \Delta t$$

⋮

n-ésimo passo: $t = n\Delta t$

$$\psi(n\Delta t, x) = \psi((n-1)\Delta t, x) + \left[\hat{L} \psi((n-1)\Delta t, x) + f((n-1)\Delta t, x) \right] \Delta t$$

A convergência é emitida o tamanho do passo de evolução Δt no indexamento da função, e numericamente:

$$\psi(n\Delta t, x) = \psi_n(x) \leftarrow \begin{array}{l} \text{"vetor em relação"} \\ \text{a } x \end{array}$$

Desse modo:

$$\psi_n(x) = \psi_{n-1} + \left[\hat{L}_{n-1} \psi_{n-1} + f_n(x) \right] \Delta t$$

Utilizando a matriz identidade

$\mathbb{1}$ de dimensão do vetor $\psi_n(x)$

(o tamanho desse vetor depende do número de pontos em x , ou de outra forma da matriz L -)

$$\psi_n(x) = \mathbb{1} \psi_{n-1} + \left[(L_{n,n-1}^T \psi_{n-1} + f_n) \Delta t \right]$$

Reagrupando os fatores:

$$\psi_n = \underbrace{\left[\mathbb{1} + L_n \Delta t \right]}_{\text{Este é denominador de propagador } U} \psi_{n-1} + f_n \Delta t$$

Este é denominador de propagador U e evolui a função ψ de t_{n-1} para t_n .

$$U(n, n-1) = \mathbb{1} + L_n \Delta t$$

no método de Euler de 1ª ordem!

O método explícito é muito instável numericamente e pode não convergir, por isso é mais útil o uso de um método integrativo (em contrapartida do método derivativo ou de diferenças finitas). (6)

→ Método Integrativo Trapezoidal "Implícito"

- Vantagem: Convergência e Estabilidade Numérica
- Desvantagem: Implica a inversão de matriz, o que pode ser computacionalmente pesado.

De volta à equação (4)

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{L}\psi(t) + f(t)$$

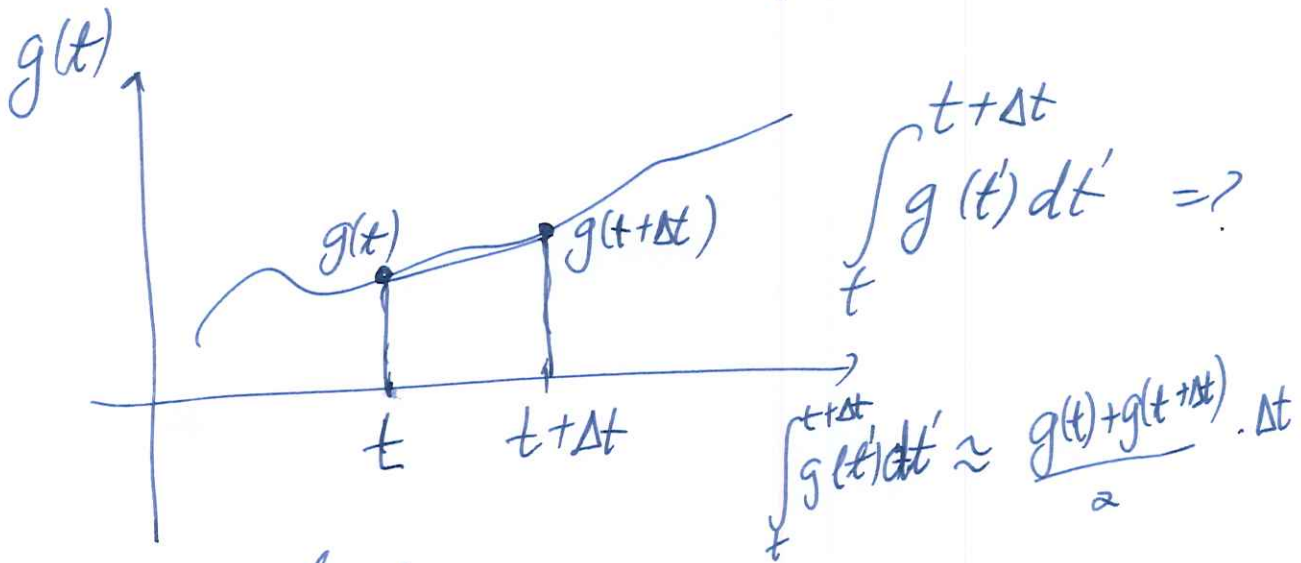
(Obs: outras dependências de $\psi(t)$, como x, y, z ou outras variáveis, estão sendo omitidas p/ simplificar a notação.)

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \mathcal{L}_t^{\rightarrow} \psi(t) + f(t)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{d\psi}{dt'} dt' = \int_t^{t+\Delta t} [\mathcal{L}_{t'}^{\rightarrow} \psi(t') + f(t')] dt'$$

$$\psi(t+\Delta t) - \psi(t) = \int_t^{t+\Delta t} [\mathcal{L}_{t'}^{\rightarrow} \psi(t') + f(t')] dt' \quad (2)$$

Uso de um método de integração. O mais simples e o trapezoidal!



Área de um trapézio

$$\begin{array}{|c|} \hline a \\ \hline \square \\ \hline b \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|} \hline l \\ \hline \end{array}
 \Rightarrow \frac{(a+b)}{2} \cdot l$$

Portanto:

$$\int_t^{t+\Delta t} [L_{\psi'} \psi(t') + f(t')] dt' \approx \frac{\left(\hat{L}_0(t+\Delta t) \psi(t+\Delta t) + \hat{L}_0(t) \psi(t) \right)}{2} \Delta t + \frac{f(t+\Delta t) + f(t)}{2} \Delta t$$

Numericamente : $\psi(t + \Delta t) = \psi_{n+1}$
 $\psi(t) = \psi_n$

- $n=0 \rightarrow \psi(0) = \psi_0 \rightarrow$ condição inicial
- $n=1 \rightarrow \psi_1$ 1º passo de propagação
- ... etc

Então: A eq. (2) na página (7) toma a forma:

$$\psi_{n+1} - \psi_n = \frac{\hat{L}_{n+1} \psi_{n+1} + \hat{L}_n \psi_n}{2} \Delta t + \frac{f_{n+1} + f_n}{2} \Delta t$$

Δt é o tamanho do passo!

Rearranjando os fatores :

(9)

$$\psi_{n+1} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \psi_{n+1} = \psi_n + \frac{\hat{L}_n \Delta t}{2} \psi_n + \left(\frac{f_{n+1} + f_n}{2} \right) \Delta t$$

Fazendo uso da identidade :

$$\left[\mathbb{1} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \right] \psi_{n+1} = \left[\mathbb{1} + \frac{\hat{L}_n \Delta t}{2} \right] \psi_n + \left(\frac{f_{n+1} + f_n}{2} \right) \Delta t$$

Isolando ψ_{n+1} (precisamos inverter uma matriz :)

$$\psi_{n+1} = \left[\mathbb{1} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \right]^{-1} \left[\mathbb{1} + \frac{\hat{L}_n \Delta t}{2} \right] \psi_n + \left[\mathbb{1} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \right]^{-1} \frac{(f_{n+1} + f_n) \Delta t}{2}$$

(3)

Definindo o propagador :

$$U(n+1, n) = \left[\mathbb{1} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \right]^{-1} \left[\mathbb{1} + \frac{\hat{L}_n \Delta t}{2} \right] \quad (4)$$

Utilizando a def (4) tem-se:

(10)

$$\Psi_{n+1} = U_{n+1,n} \Psi_n + \left[\mathbb{I} - \frac{\hat{L}_{n+1} \Delta t}{2} \right]^{-1} \frac{(f_{n+1} + f_n) \Delta t}{2} \quad (5)$$

Casos particulares: $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ Ausência de fonte} \\ \bullet \hat{L} \text{ independente de } t \end{array} \right.$

→ Nesse caso o operador de evolução precisa ser calculado uma única vez.

$$U(n+1, n) = U = \left[\mathbb{I} - \frac{\hat{L} \Delta t}{2} \right]^{-1} \left[\mathbb{I} + \frac{\hat{L} \Delta t}{2} \right]$$

$$\Psi_{n+1} = U \Psi_n$$

O algoritmo básico tem a seguinte estrutura: (11)

Dados de Entrada :

- Constantes físicas
- Def dos espaços x, t, etc
 $\Delta t, \Delta x, N_t, N_x \dots$
- Condição Inicial: ψ_0 | Fontes f



for $n = 1 : N_t$

$$\psi_{n+1} = U_{n+1/n} \psi_n + \left(\mathbb{1} - L_{n+1} \frac{\Delta t}{2} \right)^{-1} \left(\frac{f_{n+1} + f_n}{2} \right) \Delta t$$

end



Mostrar Resultados

- Figuras
- Valores numéricos de parâmetros calculados ...

Propagação
(Kernel)

Obs: Toda Eq. diferencial de ordem maior que 1 pode ser colocada como um sistema acoplado de ordem 1.

Exemplo:

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = -\omega^2 f(t) + S$$

↑
fonte

$f(t)$ a função que queremos resolver.

Define-se $\frac{df}{dt} = g$

e $\psi = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \leftarrow \underline{\underline{\text{"vetor"}}$

$$\frac{df}{dt} = g$$

$$\frac{d^2 f}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{df}{dt} \right) = \frac{dg}{dt} = -\omega^2 f + S$$

Em forma matricial:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ s \end{pmatrix}$$

↑
vetor fonte.

$$\frac{d}{dt} \psi = \hat{L} \psi + \begin{pmatrix} 0 \\ s \end{pmatrix}$$

onde $\hat{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix} !!$

Objetivos: • Resolver as equações de Difusão e de Schrödinger em 1 dim. espacial numericamente

Problemas físicos: → difusão de portadores em semicondutores
→ tunelamento quântico

* Eq. de Difusão (sem fontes)

(14)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D_0 \nabla^2 \psi$$

onde D_0 é o coeficiente de difusão.

Em 1dim espacial: $\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2}$

cujas representações matricial tem a forma:

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{dx^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & & 1 & -2 & 1 & \dots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}_{N_x \times N_x}$$

é uma matriz tridiagonal de dimensão N_x (número de pontos no eixo x)

Lembre que:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

$$\approx \frac{1}{(\Delta x)^2} [\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}]$$

j indexa o ponto x_j e $x_{j \pm 1} = x_j \pm \Delta x$

Portanto nesse caso:

$$\hat{L} = D_0 \frac{d^2}{dx^2}$$

$$= \frac{D_0}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & -2 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

$N_x \times N_x$

** Eq. de Schrödinger : $i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

onde \hat{H} é o hamiltoniano. Em 1 dim

espaçial :

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

e nesse caso:

$$\hat{L} = \frac{-i \hbar}{\hbar} \quad \text{com } \hbar \text{ a constante de Planck.}$$

$$L = \frac{-i}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right]$$

$U(x)$ é a energia potencial.