



08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

USO DO MÉTODO DE CRANCK-NICOLSON EM COSMOLOGIA QUÂNTICA

C. G. M. Santos¹ - cassia.gmsantos@gmail.com

G. A. Monerat¹ - germano.monerat@pq.cnpq.br

G. Oliveira-Neto² - gilneto@fisica.ufjf.br

E. V. Corrêa Silva³ - eduardo.vasquez@pq.cnpq.br

L. G. Ferreira Filho³ - kph120@gmail.com

¹Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brazil.

²Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas - Juiz de Fora, MG Brazil.

³Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia - Resende, RJ Brazil.

Resumo. *O método de diferenças finitas no esquema Crank-Nicolson foi implementado utilizando o software de computação simbólica Wolfram Mathematica 10.0. O objetivo específico aqui consiste na busca de soluções para a equação de Wheeler-DeWitt para os modelos quânticos de Friedmann-Robertson-Walker fechados com um fluido de radiação e um gás de Chaplygin generalizado. Utilizando o formalismo variacional para fluidos de Schultz e trabalhando no chamado minisuperespaço, a equação de Wheeler-DeWitt no caso desses modelos assume a forma de uma equação de Schrödinger dependente do tempo com um potencial efetivo na forma de uma barreira de potencial. Em outras palavras, uma equação diferencial parcial de ordem dois do tipo parabólica. Soluções numéricas para esta equação foram obtidas na forma de pacotes de onda como função do fator de escala do Universo e do tempo. Os resultados mostraram que para todos os casos os pacotes são bem definidos em todo o intervalo de integração, até mesmo quando a variável do fator de escala vai a zero. Foi também calculada a probabilidade de tunelamento quântico, ou seja, a probabilidade de a função de onda atravessar uma barreira de potencial com energia menor que a energia máxima da mesma. Para energias próximas ao topo da barreira de potencial, os resultados da probabilidade de tunelamento concordam com os resultados fornecidos pela aproximação WKB. Esse resultado mostra que o Universo pode ter surgido classicamente por um mecanismo de tunelamento. A norma da função de onda também foi calculada, em diferentes instantes de tempo. Pelos resultados gerados, notou-se que com o aumento do número de pontos da malha espacial, o valor da norma se aproxima de 1, indicando assim uma boa convergência do método implementado.*

Palavras-chave: *Método de Crank-nicolson, Cosmologia Quântica, Equação de Weeler-DeWitt*

1. INTRODUÇÃO

A teoria da relatividade geral (TRG) proposta por Einstein em 1915 permitiu um grande avanço na descrição da evolução de nosso Universo. Porém quando retrocedemos no tempo até os primeiros instantes de sua criação, a TRG torna-se incapaz de descrever certas quantidades física, levando ao aparecimento de singularidades. Isso nos leva a acreditar que para regimes em que o fator de escala do Universo torna-se pequeno, efeitos quânticos tornam-se relevantes na descrição da sua dinâmica. Para investigarmos os efeitos quânticos no Universo Primitivo, fazemos uso da equação de Wheeler-DeWitt $\hat{H}\Psi(a, T) = 0$, que para os modelos de Friedmann-Robertson-Walker, em minisuperespaços, assume a forma de uma equação tipo Schrödinger dependente do tempo. Em outras palavras, uma equação diferencial parcial do tipo parabólica. Soluções analíticas são bem pouco conhecidas para esse tipo de equação, o que nos leva a busca de soluções numéricas. Um método que se mostra eficaz para esse tipo de equação é o método de diferenças finitas no esquema Cranck & Nicolson (1947).

A aplicação deste método Crank-Nicolson abrange uma vasta gama de áreas desde a utilização em análise de transferência de calor no regime transiente de escoamento em dutos como mostra a tese de Alves (2009), na área de finanças para precificação de opções Quintino (2010) e em modelos de processo de difusão de conhecimento em um meio científico (Santos (2015), Costa (2015)) por exemplo. Em cosmologia quântica, esse método foi aplicado por Barros et al. (2007) no estudo de modelos cosmológicos quânticos de FRW com radiação e constante cosmológica, enquanto Monerat et al. (2007) fizeram uso do mesmo método para estudar modelos cosmológicos quânticos FRW com radiação e um gás de Chaplygin tradicional Chaplygin (1904). Neste trabalho, aplicaremos o método de Crank-nicolson a um modelo FRW composto por radiação e um gás de Chaplygin Generalizado, para a descrição do universo primitivo.

2. O MODELO COSMOLÓGICO QUÂNTICO

Analizamos os modelos de Friedmann-Robertson-Walker com curvatura positiva ($k = 1$), cujo conteúdo material é composto por dois fluidos: um fluido radioativo e um gás generalizado de Chaplygin, os quais são descritos pela seguinte Hamiltoniana

$$H = \frac{1}{12}p_a^2 + V_{eff}(a) - p_T, \quad (1)$$

em que p_a e p_T são respectivamente os momentos conjugados as coordenadas do fator de escala do universo e do fluido de radiação. O termo $V_{eff}(a)$ que fará o papel do potencial efetivo conterá os termos relacionados com a curvatura da seção espacial e com o gás de Chaplygin como apresentaram Bouhmadi-Lopez e Moniz (2005) na forma

$$V_{eff}(a) = 3a^2 - a^4 \left(\frac{1}{\pi}\right)^{2/(1+\alpha)} \left(A + \frac{B}{a^{3+3\alpha}}\right)^{1/(1+\alpha)}. \quad (2)$$

O caso $\alpha = 1$ foi estudado por Monerat et. al (2007).

Aplicando o formalismo de Dirac a esse modelo implica em que os momentos canônicos sejam elevados ao grau de operadores e ainda que a função de onda do Universo quando aplicado ao operador Hamiltoniano o anule

$$\hat{H}\Psi(a, T) = 0, \quad \hat{p}_a \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial a}, \quad \hat{p}_T \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial T} \quad (3)$$

Logo, a Equação de Wheeler-DeWitt, que para o presente modelo assumirá a forma de uma equação diferencial parcial

$$\left(\frac{1}{12} \frac{\partial^2}{\partial a^2} - 3a^2 + a^4 \left(\frac{1}{\pi} \right)^{2/(1+\alpha)} \left(A + \frac{B}{a^{3+3\alpha}} \right)^{1/(1+\alpha)} \right) \Psi(a, t) = -i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(a, t), \quad (4)$$

onde reparametrizamos o tempo $T = -t$.

Quanto à condição inicial, esta será escolhida como um pacote inicial normalizado, que deverá satisfazer as condições de contorno estabelecidas por Hartle-Hawking como proposto por Halliwell (1991), ou seja $\Psi(0, t) = \Psi(\infty, t) = 0$. E ainda, será escrita em termos da energia cinética média (E_m), assumindo a forma

$$\Psi(a, 0) = \left(\frac{8192 E_m^3}{\pi} \right)^{1/4} a \cdot e^{-4E_m a^2}. \quad (5)$$

3. O MÉTODO CRANCK-NICOLSON

O método proposto por Crank e Nicolson (1947) consiste em calcular numericamente os valores da função de onda $\Psi(a, t)$ em diferentes pontos de uma malha de a e t tomados sobre um certo domínio. A ideia básica do método consiste em implementar as aproximações de diferenças no ponto médio do incremento de tempo. Tal discretização permite escrever a solução da equação em termos do operador hamiltoniano (\hat{H}) do modelo

$$\Psi_{j,n+1} = \left(1 + \frac{idt}{2\hbar} \hat{H} \right)^{-1} \left(1 - \frac{idt}{2\hbar} \hat{H} \right) \Psi_{j,n} \quad (6)$$

em que os índices j e n representam respectivamente pontos da malha relacionados ao espaço e ao tempo. Aqui dt é o passo temporal e \hbar a constante de Planck. Neste caso o operador \hat{H} assume a forma tridiagonal

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} V_{eff}(a_1) + \frac{\hbar^2}{mdx^2} & -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & V_{eff}(a_2) + \frac{\hbar^2}{mdx^2} & -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & V_{eff}(a_3) + \frac{\hbar^2}{mdx^2} & -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} & V_{eff}(a_{j-1}) + \frac{\hbar^2}{mdx^2} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

O sistema em (7) representa o modelo matemático obtido pela aplicação do método de Crank-Nicolson ao sistema em estudo. Esse sistema foi solucionado para diversos valores dos parâmetros E_m , A , B e α .

Um teste aplicado sob o método para averiguar a estabilidade deste quando submetido a este modelo com um potencial efetivo não-linear, foi o cálculo da norma em função do número N de pontos da malha, em dois instantes de tempo diferentes. O resultado exibido na figura 1 nos mostra que a norma converge para o valor unitário a medida que o número N cresce.

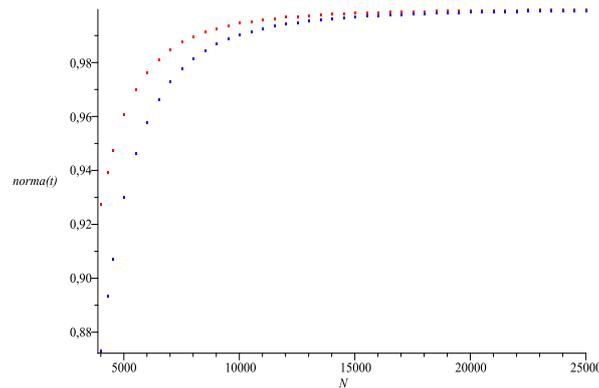


Figura 1- Comportamento da norma em função do número total de pontos da malha N . Aqui $\alpha = 1$, $k = 1$, $A = 0.001$, $B = 0.001$, $dt = 0.05$, $a_{max} = 30$, $t_i = dt(\text{azul})$, $t_{max} = 90$ (vermelho) e $E_m = 222$.

4. O PACOTE CRANCK-NICOLSON

O pacote Cranck-Nicolson C. G. M. Santos et al. (2018) faz a implementação do método de diferenças finitas no esquema Cranck-Nicolson utilizando o software de computação simbólica Mathematica 10.0, Wolfram Research Inc. (2014), de acordo com o algoritmo simplificado:

1. Cálculo do vetor condição inicial;
2. Cálculo do vetor potencial em cada ponto da malha espacial;
3. Construção das matrizes de coeficientes;
4. Solução do sistema linear;
5. Interpolação da solução;
6. Cálculo da norma;
7. Cálculo da probabilidade de tunelamento.

Para a solução do sistema foi utilizado o pacote Linear Solve, parte do Mathematica 10.0. O Linear Solve soluciona o sistema selecionando automaticamente o melhor método para tal. Já a interpolação dos resultados foi feita utilizando o método Cubic Splines. Para a resolução das integrais que fazem parte do cálculo da norma e da probabilidade de tunelamento optamos pela regra de quadratura de Clenshaw-Curtis. A dinâmica de solução da rotina consiste no fornecimento da equação que caracteriza o potencial e a condição inicial juntamente com a expressão para as diagonais da matriz de coeficientes.

5. RESULTADOS OBTIDOS

O método Cranck-nicolson foi aplicado para diversos valores dos parâmetros. Em todos eles foi possível obter um pacote de onda de norma finita e bem definido em todo o espaço, até mesmo quando $a = 0$. Para exemplificar a figura 2 exhibe o comportamento da densidade de

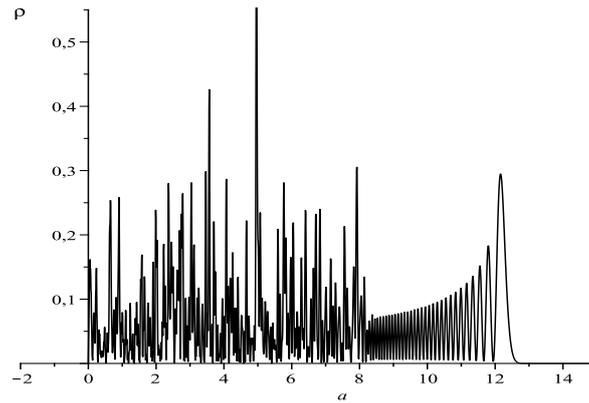


Figura 2- Solução para a equação de Wheeler-DeWitt. $|\Psi(a, t_{max})|^2 = \rho$, para $\alpha = 0.98$, $A = 0.001$, $B = 0.001$, $E_{max} = 230$, no instante $t_{max} = 90$, quando Ψ atinge o infinito numérico em $a = 30$. qui foi considerado $N = 4273$ e $dt = 0.05$. O ponto de retorno à direita da barreira de potencial nesse caso é $a_2 = 13.3004293206986$

probabilidade $|\Psi(a, t_{max})|^2$ como função do fator de escala, calculada no instante de tempo em que o pacote atinge o infinito numérico.

A figura 2 nos mostra que parte do pacote de onda consegue atravessar a barreira de potencial. O próximo passo foi determinarmos qual a probabilidade de tunelamento (PT) para um dado conjunto de valores fixos dos parâmetros do modelo. A probabilidade de tunelamento (PT) foi calculada para diferentes valores da energia média E_m :

$$PT = \frac{\int_{a_2}^{a_{max}} |\Psi(a, t_{max})|^2 da}{\int_0^{a_{max}} |\Psi(a, t_{max})|^2 da}, \quad (8)$$

em que a_{max} representa o infinito numérico escolhido. Os resultados obtidos foram comparados com a probabilidade de tunelamento na aproximação WKB conforme definida por Merzbacher (1998):

$$PT_{WKB} = \frac{4}{(2\theta + \frac{1}{2\theta})^2}, \quad \text{em que } \theta = e^{\int_{a_1}^{a_2} da \sqrt{12(V_{eff}(a) - E)}}. \quad (9)$$

em que a_1 e a_2 correspondem aos pontos de retorno do potencial definido em (2) associados a uma determinada energia E . A figura 3 exhibe a dependência da probabilidade de tunelamento em função da energia E_m

6. CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS FINAIS

O método de crank-Nicolson foi implementado utilizando o software Mathematica 10.0 e o programa resultante, utilizado na solução da equação de Wheeler-DeWitt para os modelos quânticos homogêneos e isotrópicos de FRW com curvatura positiva, composto por um fluido radioativo e um gás de Chaplygin generalizado. Em todos os casos analisados foi possível obter soluções para a equação de Wheeler-DeWitt na forma de pacotes de onda de norma finita e bem definido em todo o espaço, até mesmo quando o fator de escala se anula. Observou-se ainda o fenômeno de tunelamento quântico, como sendo um possível mecanismo para o nascimento do

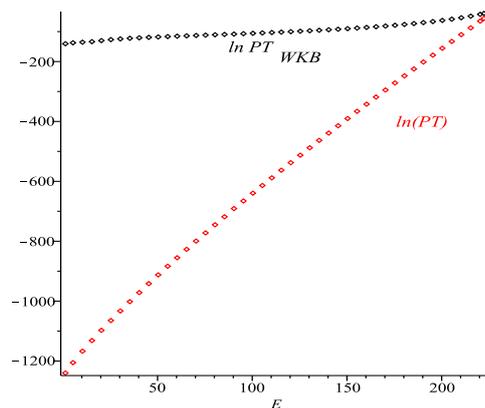


Figura 3- Comportamento das probabilidades de tunelamento PT e PT_{WKB} em função da energia média E_m . Aqui $\alpha = 0.98$, $k = 1$, $A = 0.001$, $B = 0.001$, $dt = 0.05$, $a_{max} = 30$ e $t_{max} = 90$.

Universo. O cálculo da probabilidade de tunelamento para diferentes valores da energia média do pacote de onda mostrou que a medida que a energia média aumenta, também aumenta a probabilidade do tunelamento. Para energias próximas ao topo da barreira, os resultados concordam com aqueles obtidos na aproximação WKB. Quanto a estabilidade do método, verificamos que a medida que cresce o número de pontos da malha, a norma converge para a unidade.

Agradecimentos

C. G. M. Santos ao CNPq pela bolsa de Mestrado concedida *agradece* ao CNPq pela bolsa de Mestrado concedida.

REFERÊNCIAS

- CRANK J., NICOLSON P. A. Practical Method For Numerical Evaluation Of Solutions Of Partial Differential Equations Of The Heat-Conduction Type. Proc. Cambridge Philos. Soc., v43, p. 50–67. (1947).
- QUINTINO, E. R. Método de Diferenças Finitas Aplicadas à Precificação de Opções. 2010. Dissertação (Mestrado no Programa de Pós-Graduação em Computação) Universidade Federal Fluminense, (2010).
- DOS SANTOS, Marcelo et al. O Método de Crank-Nicolson aplicado ao Modelo de Difusão de Conhecimento: Uma Simulação para o Processo de Transmissão de Conhecimento. International Journal of Knowledge Engineering and Management (IJKEM), v. 4, n. 9, p. 129-146, (2015).
- Fredenslund A. e Sorensen, J.M. (1993), “Group Contribution Estimation Methods”, in *Models for Thermodynamic and Phase Equilibria Calculations*, S.I. Sandler (ed.), Marcel Dekker, Inc., New York.
- DE BARROS, J. Acacio et al. Tunneling probability for the birth of an asymptotically de Sitter universe. Physical Review D, v. 75, n. 10, p. 104004, 2007.
- MONERAT, G. A. et al. Dynamics of the early universe and the initial conditions for inflation in a model with radiation and a Chaplygin gas. Physical Review D, v. 76, n. 2, p. 024017, (2007).
- CHAPLYGIN, S. A. Scientific Memoirs, Moscow Univ. Math. Phys. Sec, v. 21, n. 1, (1904).
- BOUHMADI-LOPEZ, M., MONIZ, P. V.. FRW quantum cosmology with a generalized Chaplygin gas. Physical Review D, v. 71, n. 6, p. 063521, (2005).
- HALLIWELL, J. J.; COLEMAN, S. Quantum Cosmology and Baby Universes. eds. Coleman S., Hartle JB, Piran T. and Weinberg S., World Scientific, Singapore, (1991).
- MERZBACHER, E. Quantum Mechanics. 3rd ed. John Wiley & Sons, Inc., New York, (1998), Chap. 7.
- C. G. M. Santos, G. A. Monerat, G. Oliveira-Neto, E. V. Corrêa Silva, L. G. Ferreira Filho. Crank-Nicolson Package (not published), (2018).

USE OF THE CRANCK-NICOLSON METHOD IN QUANTUM COSMOLOGY

Abstract. *The finite difference method in the Crank-Nicolson scheme was implemented using the Wolfram Mathematica 10.0 symbolic computation software to then be applied to Friedmann-Robertson-Walker quantum models enclosed with a radiation fluid and a generalized Chaplygin gas. The quantum dynamics of these models is described by the Wheeler-DeWitt equation, which takes the form of a time-dependent Schrödinger equation when an effective potential is used in the form of a potential barrier. Numerical solutions for this equation were obtained and the quantum tunneling probability, that is, the probability of the wave function to cross a potential barrier with energy smaller than the maximum energy of the barrier, was calculated. For energies near the top of the potential barrier, the tunneling probability results agree with the results provided by the WKB approach. The norm of the wave function was also calculated, at different instants of time. From the results generated, it was noticed that with the increase of the number of points of the space mesh, the value of the norm approaches 1, indicating a good convergence of the method.*

Keywords: *Crank-nicolson method. Quantum Cosmology. Wheeler-DeWitt equation*