

Antonio Carlos Henriques Marques

Uma comparação entre os métodos
EFGM e dos Elementos Finitos na solução
da equação de Schrödinger unidimensional



1910000980



7

Uma comparação entre os métodos EFGM e dos Elementos Finitos na solução da equação de Schrödinger unidimensional.

Antonio Carlos Henriques Marques
Antonio Carlos Henriques Marques

Dissertação apresentada ao Instituto de Física, Letras e
Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista "Júlio de
Mesquita Filho", Campus de São José do Rio Preto, para a
obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. José Márcio Machado

São José do Rio Preto

2001

Uma comparação entre os métodos EFGM e dos Elementos Finitos na solução da equação de Schrödinger unidimensional.



T 980/01

Antonio Carlos Henriques Marques

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Câmpus de São José do Rio Preto, para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. José Marcio Machado.

São José do Rio Preto

2001

Uma comparação entre os métodos EFGM e dos Elementos Finitos na solução da equação de Schrödinger unidimensional.

Antonio Carlos Henriques Marques

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e
Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista "Júlio de
Mesquita Filho", Câmpus de São José do Rio Preto, para a
obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. José Marcio Machado.

São José do Rio Preto

2001



Uma comparação entre os métodos EFGM e dos Elementos Finitos na solução da equação de Schrödinger unidimensional.

Antonio Carlos Henriques Marques

COMISSÃO JULGADORA

DISSERTAÇÃO PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE

Pres. e Orientador Prof. Dr. José Márcio Machado

2ª. Examinadora Profª. Drª. Nancy Mieko Abe

3º. Examinador Prof. Dr. Sérgio Luis Lopes Verardi.....



Resumo

Este trabalho trata da solução numérica de uma equação diferencial parcial utilizando-se o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método EFGM. Além de uma revisão formal sobre o MEF, o objetivo deste trabalho é mostrar alguns pressupostos necessários para a aplicação dos métodos numéricos a equações diferenciais parciais e desenvolver uma implementação com os softwares *Mathematica* e *Matlab* para solução numérica da equação de Schrödinger, caso linear independente do tempo, aplicada a dois casos clássicos: poço de potencial e oscilador harmônico simples. Os resultados alcançados são comparados aos apresentados pela utilização do Método dos Elementos Finitos - artigos de Koshiba et al [30], [31] e Goloskie [21]; aproximação por Sturm-Liouville - descrita e implementada no ambiente *Mathematica* por Bhader [7]; e Método EFGM - artigos de Dolbow and Belytschko [12] e Machado et al [27] implementados no ambiente *Matlab*.



Abstract

This work treats of the numeric solution of a partial differential equation being used the Finite Element Method (MEF) and Element Free Galerkin Method (EFGM). Besides a formal revision on MEF, the goal of this work is to show some necessary requirements for the application of the numeric methods to partial differential equations and to develop an implementation with the softwares Mathematica and Matlab in the numerical solution of the equation of Schrödinger, for the time independent linear case, applied to two classic cases: quantum well and simple harmonic oscillator. The reached results are tested graphically and compared to the presented by the use of the Method of the Finite Elements - works of Koshiba et al ([30], [31]) and Goloskie ([21]); problem the eigenvalue of Sturm-Liouville problem - described and implemented in *Mathematica* environment by Bhader ([7]); and Método EFGM - works of Dolbow and Belytschko ([12]), and Machado et al ([27]) implemented in Matlab.

Agradecimentos

Agradecimentos especiais ao meu orientador prof. Dr. José Márcio, ao amigo e colega de trabalho prof. Antonio Venezuela, ao prof. Dr. Walter Jélio, e a todos os meus amigos, em especial ao Polin, que de uma forma ou de outra me auxiliaram nesta empreitada: Heloy, Cristine, Celival, Mircia, José Arnaldo, Sandra, Fabrício, Cláudia, Lucas, Claudinéia, Romilda, Clinton e Osma.

Para Vera,
e aos meus filhos,
Felipe, Bruno
Dedico.

Agradecimentos

Agradecimentos especiais ao meu orientador prof. Dr. José Marcio, ao amigo e colega de trabalho prof. Antonio Venezuela, ao prof. Dr. Walter Júlio, e a todos os meus amigos, em especial ao Palin, que de uma forma ou de outra me ajudaram nesta empreitada: Heleny, Cristina, Celinha, Milena, José Arnaldo, Sandra, Fabricio, Cláudia, Luisa, Claudinéia, Romildo, Clinton e Carina.

1 A equação de Schrödinger e sua importância	14
1.1 A equação de Schrödinger	16
1.2 A equação de Schrödinger independente do tempo	21
1.2.1 Propriedades das ondas de matéria	24
1.2.2 Equações básicas	25
2 Formulação do Método dos Elementos Finitos (MEF) e sua aplicação na solução da equação de Schrödinger	27
2.1 Fundamentos para aplicação do Método dos Elementos Finitos	27
2.1.1 Preliminares matemáticas	29
2.1.2 O método de RITZ clássico	35
2.1.3 O método de GALERKIN	36
2.1.4 Aproximação RITZ-GALERKIN	36
2.1.5 Espaço Polinomial Discretos - O Método dos Elementos Finitos	37
2.1.6 Relação com o Método das Diferenças	40
2.2 Os Elementos Finitos	41
2.2.1 A construção de um espaço de Elementos Finitos	41

Índice

Introdução	11
1 A equação de Schrödinger e sua importância	14
1.1 A equação de Schrödinger	16
1.2 A equação de Schrödinger independente do tempo	21
1.2.1 Propriedades das ondas de matéria	24
1.2.2 Equações básicas	25
2 Formulação do Método dos Elementos Finitos (MEF) e sua aplicação na solução da equação de Schrödinger.	27
2.1 Fundamentos para aplicação do Método dos Elementos Finitos.	27
2.1.1 Preliminares matemáticas	29
2.1.2 O método de RITZ clássico	35
2.1.3 O método de GALERKIN	35
2.1.4 Aproximação RITZ-GALERKIN	36
2.1.5 Espaços Polinomiais Discretos - O Método dos Elementos Finitos	37
2.1.6 Relação com o Método das Diferenças	40
2.2 Os Elementos Finitos.	41
2.2.1 A construção de um espaço de Elementos Finitos.	41
Apêndice A	103

2.2.2	O cálculo dos elementos finitos.	42
2.2.3	Elementos e coordenadas	48
2.3	Uma aplicação da equação de Schrödinger por elementos finitos.....	54
3	Implementação no ambiente <i>Mathematica</i> de uma rotina baseada no MEF capaz de resolver a equação de Schrödinger para alguns tipos de potenciais unidimensionais	59
3.1	As partes do programa	60
3.2	Caso 1 - O poço de potencial.	64
3.2.1	Resultados para uma partícula em um poço de potencial	66
3.2.2	Verificação gráfica	72
3.3	Caso 2 - O Oscilador Harmônico.	78
3.3.1	Resultados para o oscilador harmônico simples.	79
4	O Método EFGM - “Element Free Galerkin Method ”.....	81
4.1	O EFGM em uma dimensão.....	82
4.1.1	Os aproximadores de ajuste mínimo de mudança.....	82
4.1.2	Formulação no EFGM para a equação de Schrödinger em uma dimensão.	87
4.2	Aplicação do EFGM em programa MATLAB para simulação de resultados do poço de potencial e oscilador harmônico	90
4.2.1	Caso 1 - O poço de potencial.....	92
4.2.2	Caso 2 - O oscilador harmônico clássico.	95
	Conclusão.....	97
	Referências Bibliográficas	99
	Apêndice A Rotina no Mathematica para a determinação dos autoestados em um poço de potencial utilizando MEF.....	103



Apêndice B	Rotina no Mathematica para solução do Oscilador Harmônico Simples utilizando MEF.	109
-------------------	---	------------

Apêndice C	Rotina em MATLAB para a determinação dos autoestados em um poço de potencial utilizando EFGM.....	115
-------------------	--	------------

Apêndice D	Rotina em MATLAB para solução do Oscilador Harmônico Simples utilizando EFGM.	122
-------------------	---	------------

Tabela 3.2.3	Autovetores de 251 elementos a 501 elementos	68
--------------	--	----

Tabela 3.2.4	Autovetores de 551 elementos a 751 elementos	68
--------------	--	----

Tabela 3.2.5	Autovetores de 901 elementos a 1001 elementos	69
--------------	---	----

Tabela 3.2.6	Autovetores de 1051 elementos a 1751 elementos	70
--------------	--	----

Tabela 3.2.7	Autovetores para construção do gráfico de convergência	71
--------------	--	----

Tabela 3.2.8	Autovetores esperados e autovetores obtidos por simulação	80
--------------	---	----

Tabela 4.2.1	Comparação entre os valores MEF e EFGM	93
--------------	--	----

Tabela 4.2.2	Comparação entre os valores esperados e simulados pelo EFGM	95
--------------	---	----

Lista de Tabelas

Tabela 2.1.1	Condições e nomes	31
Tabela 2.2.2	Parâmetros para aproximações	52
Tabela 3.2.1	Resultados Bhader [7]	67
Tabela 3.2.2	Autovalores de 101 elementos a 301 elementos	67
Tabela 3.2.3	Autovalores de 331 elementos a 531 elementos	68
Tabela 3.2.4	Autovalores de 551 elementos a 751 elementos	68
Tabela 3.2.5	Autovalores de 801 elementos a 1001 elementos	69
Tabela 3.2.6	Autovalores de 1031 elementos a 1751 elementos	70
Tabela 3.2.7	Autovalores para construção do gráfico de convergência.....	71
Tabela 3.3.8	Autovalores esperados e autovalores obtidos por simulação.....	80
Tabela 4.2.1	Comparativo entre o MEF e o EFGM.....	93
Tabela 4.2.2	Comparativo entre os valores esperados e simulados pelo EFGM.	95
Figura 4.1.3	Função peso constante para o perfil compacto e aproximação $\phi^h(x)$	87
Figura 4.1.4	Função peso contínua e aproximação $\phi^h(x)$	88
Figura 4.1.5	Função peso sobre spline cúbico e aproximação $\phi^h(x)$	89
Figura 4.2.6	Diagrama de forças - problema EFGM	91
Figura 4.2.7	Representação dos resultados para o peso de polinômio - EFGM	94
Figura 4.2.8	Representação dos resultados para o perfil simples - EFGM	95

Lista de Figuras

Figura 1.2.1	Barreira de potencial arbitrária.....	22
Figura 1.2.2	Poço de potencial arbitrário.....	23
Figura 2.1.1	Função base - delta de Kronecker	38
Figura 2.2.2	Região tridimensional Ω e as fronteiras Γ_f e Γ_n	44
Figura 2.2.3	Elemento linear	49
Figura 3.1.1	Numeração para elementos desconectados e conectados	61
Figura 3.1.2	Diagrama de blocos - partes do programa.....	63
Figura 3.2.3	Poço de potencial retangular finito.....	64
Figura 3.2.4	Convergência dos autovalores para o poço de potencial	72
Figura 3.2.5	Função de onda dentro do poço	74
Figura 4.1.1	Sobreposição de domínios de influência no ponto X - uma dimensão	83
Figura 4.1.2	Função peso constante e aproximação $u^h(x)$	86
Figura 4.1.3	Função peso constante com suporte compacto e aproximação $u^h(x)$	87
Figura 4.1.4	Função peso contínua e aproximação $u^h(x)$	88
Figura 4.1.5	Função peso cubic spline sobre o raio normalizado	89
Figura 4.2.6	Diagrama de blocos - programa EFGM	91
Figura 4.2.7	Representação dos autoestados para o poço de potencial - EFGM	94
Figura 4.2.8	Representação dos autoestados para o oscilador simples - EFGM	96

Introdução

Desde o advento da mecânica quântica, a solução de problemas nessa área é complexa e sujeita a muitas instabilidades. Uma das equações básicas é a de Schrödinger, por sinal uma equação diferencial parcial de 2ª ordem. A equação de Schrödinger é tradicionalmente resolvida através de um sistema de equações diferenciais (por exemplo o problema de autovalores de Sturm Liouville) ou por métodos de aproximação inicial e respectivas convergências. Alguns casos particulares são resolvidos analiticamente e o restante somente através de métodos numéricos, destes o Método dos Elementos Finitos (MEF) tem se destacado nos últimos anos, e mais recentemente o Método EFGM (Element Free Galerkin Method - ainda sem uma tradução de consenso).

O uso de métodos numéricos não quer dizer que a física quântica, a matemática aplicada e as análises teóricas estejam sendo preteridas. Muito pelo contrário, é comum as três técnicas se complementarem no estudo de algum fenômeno particular. No primeiro caso é da física a base teórica para a interpretação do fenômeno. No segundo caso, as equações de novos modelos teóricos são resolvidos por meio de técnicas numéricas e os resultados são comparados com experimentos, confirmando ou não a validade dos modelos. Finalmente, simula-se o fenômeno e procede-se à análise dos resultados com os valores assintóticos previstos pela mecânica quântica. O objetivo dos métodos numéricos aplicados à mecânica quântica é reduzir o número de experimentos e explorar fenômenos que não poderiam ser estudados em laboratórios de forma prática, dessa forma pode-se avaliar numericamente os diversos parâmetros relevantes ao problema. Esses podem ser facilmente alterados até que o resultado da simulação atenda às exigências de um projeto. Tudo isso de forma bem mais conveniente e com custos e tempos menores do que apenas utilizando técnicas experimentais e análises teóricas.



O Método dos Elementos finitos (MEF), em vez de considerar equações diferenciais para um dado sistema a ser estudado, adota funcionais (expressões variacionais) sobre os quais aplica-se o princípio variacional em uma região de interesse dividida em partes chamadas de elementos. Um modelo equivalente discretizado é construído para cada elemento e as contribuições de cada elemento são consideradas no sistema.

Em outras palavras, o MEF pode ser considerado uma sub classe do método de Ritz-Rayleigh¹, onde pedaços discretizados definidos por funções polinomiais são usadas para funções demonstração e infinitos graus de liberdade do sistema são discretizados ou substituídos por um número finito de parâmetros desconhecidos.²

Nos procedimentos clássicos sem subdivisão do processo, o sistema é modelado usando-se funções analíticas sobre toda a região de interesse. Estes procedimentos, geralmente, são aplicáveis unicamente a materiais e geometrias simples. Das várias formas de discretização possíveis, uma das mais simples é o Método das Diferenças Finitas (MDF) e sua versão tradicional usa uma malha regular que nada mais é que uma grade retangular com nós nas intersecções das linhas ortogonais. Entretanto, uma malha regular não é adequada para fronteiras curvas ou interfaces, pois estas interceptam as linhas de grade obliquamente aos nós. Também, uma malha regular não é adequada para problemas com campos variáveis.

No MEF, a região é subdividida em elementos que, por sua vez, podem ser sub-regiões. Os elementos podem ter várias formas, tal como triângulos e retângulos permitindo seu uso em malhas irregulares. Também, o MEF é adequado para problemas com variações de campo e sua aproximação pode ser facilmente adaptada para problemas anisotrópicos e não homogêneos. Além disso, o elemento finito pode ser modelado não por um método variacional mas pelo método de Galerkin, que é um método de resíduos, ou seja, o MEF pode ser aplicado a problemas onde não exista o princípio variacional ou onde não possa ser possível sua identificação.

Já o Método EFGM considera a região como uma nuvem de *pontos* e não mais *elementos* como no MEF, daí ser considerado *meshless*, ou seja não necessita de elementos ou malha para sua discretização mas apenas pontos. Sua vantagem surge juntamente com

¹ Ver BUTKOV, Eugene. *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1988, p. 564.

² KOSHIBA, Masanori. *Optical Waveguide Theory by Finite Element Methods*, 1993.



um maior desenvolvimento das técnicas computacionais, sem as quais o método poderia ser muito demorado ou até mesmo inexecutável. Dessa forma, todos aqueles problemas com condições de contorno e fronteiras complicados de difícil discretização por elementos ou malhas, agora podem ser tratados e terem soluções numéricas com precisão muito boas.

Capítulo 1

A equação de Schrödinger e sua importância

No século XIX, com a mecânica clássica, se fez possível a previsão da velocidade de um ponto material, podendo, pelas leis mecânicas, traçar sua trajetória futura. Essa herança dos postulados newtonianos entrou em choque quando das experiências de Planck, Millikan, Compton e outros, que se estabeleceram no domínio da luz e da matéria, onde estes ora se comportavam como partículas. Uma partícula é um objeto pequeno, bem localizado no espaço, enquanto uma onda se propaga pelo espaço, sendo a onda uma descrição inadequada para representar objetos em escala espacial.

A natureza dual da luz e da matéria levou a uma revolução experimental inquietante, que mostrou a inadequação da física clássica para representar de imagem e linguagem para descrever a realidade quântica.

Na física clássica, a energia é transportada por ondas ou partículas. Um exemplo desse fenômeno é uma onda transportando energia sobre um espelho d'água. Esse mesmo mundo não pode ser usado quando se trata de radiação ou quando se partícula elementares como elétrons e prótons. Mais ainda, a dualidade onda-partícula da física quântica não é uma dualidade simples, como a dualidade entre ondas e partículas no mundo clássico. O entendimento da natureza da matéria e da energia é mais complexo e mais rico do que o da física clássica. O entendimento da natureza da matéria e da energia é mais complexo e mais rico do que o da física clássica.

Capítulo 1

A equação de Schrödinger e sua importância

De acordo com a mecânica clássica, se for conhecida a posição e a velocidade de um ponto material, pode-se prever, pelas leis mecânicas, toda sua trajetória futura. Essa herança dos postulados newtonianos entrou em choque quando das experiências de Plank, Milikan, Compton e muitos outros que se apoiaram na interação da luz com elétrons onde estes ora são ondas ora são partículas. Uma partícula é um objeto pequeno, bem localizado no espaço, enquanto onda é algo que se propaga dispersa pelo espaço; partícula e onda são descrições incompatíveis, antitéticas para representar objetos com extensão espacial.

A *natureza dual da luz* as vezes partícula, as vezes onda, foi um resultado experimental inquestionável que mostrou a inadequação da física clássica para representações de imagem e linguagem para descrever a realidade quântica.

Na física clássica, a energia é transportada por ondas ou partículas. Um exemplo desse fenômeno é uma onda transportando energia sobre um espelho d'água. Esse mesmo modelo não pode ser usado quando se trata de radiação ou quando de partículas elementares como pósitrons e nêutrons. Mais ainda, a *dualidade onda-partícula* da luz mostra que esta não é uma onda ou partícula, mas, de certa forma, ambas - depende de como são investigadas suas propriedades, ou seja, depende de como é realizada a experiência. O observador de fenômenos físicos quânticos não tem um comportamento passivo, pois depende dele qual

* DE QUESENNE, MARCELO, *Quântica e Relatividade*, pg 42, Editora de Livros de Física.



será o comportamento da luz [14, pp. 134, 1976].

Louis de Broglie mostrou que a *dualidade onda-partícula* não era apenas uma peculiaridade da luz, mas de toda a matéria. O postulado de *de Broglie* diz que o movimento de uma partícula microscópica é governado pela propagação de uma onda associada a ela, sem no entanto especificar de que forma essa onda se propaga: “...cada vez que, em um sistema de referência, um elemento material, no sentido mais geral possui uma energia W , existe nesse sistema um fenômeno periódico que possui a frequência ν definida pela relação do quantum $W = h\nu$ ”³. Desta forma, matéria e luz não poderiam mais serem descritas em termos clássicos. A mecânica quântica proposta por Heisenberg, através do *princípio da incerteza*, era capaz de descrever o comportamento de átomos e suas transições sem associar imagens clássicas tais como bolas de bilhar ou sistemas solares em miniatura, apenas como números através de uma *mecânica matricial*. Surgiu uma nova forma de representação de fenômenos físicos.

Através do princípio da incerteza é possível compreender que a radiação e matéria tenham uma natureza dual. Vários paradoxos são propostos na literatura da física, como exemplo - a experiência de Young, modificando-se o anteparo (tela de projeção por uma superfície fotoelétrica) tem-se uma radiação constituída por “fótons” e não mais as clássicas franjas de interferência conhecidas da mecânica ondulatória. “Na verdade o princípio da incerteza, ao contrário da física clássica que descreve uma partícula deterministicamente, mostra que é impossível saber, com precisão necessária, os momentos instantâneos e as posições das partículas” [20], simultaneamente.

É nesse complexo sistema teorizado que surge uma nova mecânica: a mecânica ondulatória de Erwin Schrödinger, na verdade uma generalização do postulado de *de Broglie*. A mecânica ondulatória de Erwin Schrödinger consiste basicamente de uma *função de onda* que não descreve a evolução de um elétron, mas a probabilidade de um elétron ser encontrado em uma determinada posição, ou seja, o que se prevê é a probabilidade de se

³ DUQUESNE, Maurice; Matéria e Antimatéria, pg 45, Postulado de Louis de Broglie.



obter um determinado resultado.

A *teoria de Schrödinger da mecânica quântica* é uma ferramenta para se tratar de problemas complicados que ocorrem na natureza que envolvam propagação de ondas, e destes podem-se citar projetos de eletro-eletrônica tais como semicondutores, “chips” para processadores eletrônicos, etc. Essa teoria fornece o procedimento geral para tratar o comportamento de partículas em qualquer sistema microscópico desde que especificadas as leis do movimento ondulatório que as partículas obedecem. Cada sistema tem especificada a equação que descreve o comportamento da função de onda, e também a relação entre esse comportamento e o comportamento da partícula.

1.1 A equação de Schrödinger

A *equação de Schrödinger* é uma equação diferencial cuja solução fornece a função de onda $\Psi(x, t)$, uma vez conhecida a força que atua sobre a partícula associada e especificado o potencial. A solução da equação de Schrödinger é uma relação entre a solução $\Psi(x, t)$ e certas derivadas de $\Psi(x, t)$ em relação às variáveis independentes x e t . Como existe mais de uma variável independente, tem-se derivadas parciais do tipo

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2}$$

A obtenção da equação de Schrödinger está fundamentada em um conjunto de considerações físicas e matemáticas, apresentadas a seguir:

1 - Deve ser coerente com os postulados de *de Broglie-Einstein*, ou seja, é razoável que esteja relacionada com o comprimento de onda λ da função de onda com o momento p da partícula associada, e a frequência v da função de onda com energia total E da partícula

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad v = \frac{E}{h}$$

onde h é a constante de Plank.

2 - Deve ser consistente com a equação que relaciona a energia total E de uma partícula de massa m com sua energia cinética $p^2/2m + V$ e sua energia potencial V .

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$



3 - Deve ser *linear* em $\Psi(x, t)$, isto é, se $\Psi_1(x, t)$ e $\Psi_2(x, t)$ são duas soluções diferentes da equação para uma dada energia potencial V , então qualquer combinação linear (envolve primeiras potências) arbitrária (as constantes podem ter valores quaisquer) dessas soluções, $\Psi(x, t) = c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t)$, também é uma solução. A exigência de *linearidade* garante que se pode *somar funções de onda* para produzir interferências destrutivas, características das ondas⁴.

4 - A energia potencial V é em geral uma função de x , e possivelmente até de t . No caso de uma partícula livre, $V(x, t) = V_0$ e a força que atua sobre a partícula será dada por

$$F = \frac{\partial V(x, t)}{\partial x}$$

e, se V_0 é constante, tem-se $F = 0$ e o momento p da partícula será constante, bem como sua energia total E e os valores de $\lambda = h/p$ e $v = E/h$. Em vista disso, pode-se supor que a equação diferencial desejada admitirá soluções de onda senoidal com comprimento de onda e frequência constantes.

Considerando-se as relações de *de Broglie-Einstein* do item 1 para escrever a equação de energia do item 2 em termos de λ e v , tem-se:

$$\frac{h^2}{2m \lambda^2} + V(x, t) = hv$$

Introduzindo as grandezas *número de onda angular* $k = 2\pi/\lambda$, *frequência angular* $\omega = 2\pi v$ e *constante de Planck* dividida por 2π $\hbar = h/2\pi$, obtem-se

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x, t) = \hbar \omega \quad (1.1)$$

Para satisfazer a condição de *linearidade* é necessário que cada termo na equação diferencial seja linear em $\Psi(x, t)$, isto é, seja proporcional à primeira potência de $\Psi(x, t)$ ⁵.

⁴ Experiências, como as de Davisson e Germer, mostram que as figuras de difração também são encontradas no movimento dos elétrons e outras partículas atômicas. (Eisberg, 173)

⁵ Note-se que qualquer derivada de $\Psi(x, t)$ possui esta propriedade. A derivada cresce pelo mesmo fator da mudança do valor de $\Psi(x, t)$, por exemplo, a variação do valor de

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

resultante da mudança do valor de $\Psi(x, t)$ por um fator c , ou seja

$$\frac{\partial^2 [c\Psi(x, t)]}{\partial x^2} = c \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

onde c é uma constante qualquer. Para que seja linear em $\Psi(x, t)$, a equação diferencial não pode conter

Para verificação do item 4, considere uma onda senoidal simples, tal como

$$\Psi(x, t) = \text{sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - vt \right)$$

ou mesmo uma função de onda formada pela soma de várias ondas senoidais (partícula livre). Substituindo as grandezas k e ω tem-se $\Psi(x, t) = \text{sen}(kx - \omega t)$ e derivando parcialmente em relação a x e a t tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= \frac{\partial \text{sen}(kx - \omega t)}{\partial x} = k \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= k \frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial x} = -k^2 \text{sen}(kx - \omega t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial \text{sen}(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} &= -\omega \frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega^2 \text{sen}(kx - \omega t) \end{aligned} \quad (1.2)$$

A primeira derivada temporal (em relação a t) introduz o fator $-\omega$ e a segunda derivada espacial (em relação a x) introduz o fator $-k^2$. A equação diferencial em estudo deve ser consistente com a equação (1.1), que contém um fator de k^2 em um termo e um fator ω em outro. Deduz-se que a equação diferencial deve conter uma segunda derivada espacial de $\Psi(x, t)$ e uma primeira derivada temporal de $\Psi(x, t)$, e que também deve haver um termo contendo um fator de $V(x, t)$, pois ele está presente em (1.1), e para garantir a linearidade, esse termo deve conter um fator de $\Psi(x, t)$. Juntando essas idéias, tem-se:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = \beta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

Os termos α e β são utilizados para fornecer os ajustes necessários às várias exigências que a equação (1.3) deve satisfazer. Para descobrir os valores destes fatores, considere um potencial constante $V(x, t) = V_0$ e calcule $\Psi(x, t)$ e suas derivadas. A partir da equação (1.1) e de (1.2) obtem-se:

$$-\alpha \text{sen}(kx - \omega t) k^2 + \text{sen}(kx - \omega t) V_0 = -\beta \cos(kx - \omega t) \omega$$

assim, tem-se α e β de forma a satisfazer as condições dos itens 1 e 2 apenas para combinações lineares especiais de x e t para os quais $\text{sen}(kx - \omega t) = \cos(kx - \omega t)$. Para contornar

nenhum termo independente de $\Psi(x, t)$, ou seja, que seja proporcional a $[\Psi(x, t)]^0$, ou a $[\Psi(x, t)]^2$, ou a qualquer potência superior.

este problema, ao invés de utilizar uma única função de onda, usa-se a combinação

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) \quad (1.4)$$

onde γ é uma constante para dar flexibilidade adicional à equação. Calculando as derivadas para esta equação, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= -k \operatorname{sen}(kx - \omega t) + k \gamma \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -k^2 \cos(kx - \omega t) - k^2 \gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - \omega \gamma \cos(kx - \omega t) \end{aligned} \quad (1.5)$$

substituindo (1.4) e (1.5) em (1.3), e fazendo $V(x, t) = V_0$, obtém-se

$$\begin{aligned} -\alpha k^2 \cos(kx - \omega t) - \alpha k^2 \gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) + V_0 \cos(kx - \omega t) + V_0 \gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) = \\ = \beta \omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - \beta \omega \gamma \cos(kx - \omega t) \end{aligned} \quad (1.6)$$

simplificando

$$[-\alpha k^2 + V_0 + \beta \omega \gamma] \cos(kx - \omega t) + [-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma - \beta \omega] \operatorname{sen}(kx - \omega t) = 0$$

Para que esta desigualdade seja válida, para todas as combinações das variáveis independentes x e t , é necessário que os coeficientes do seno e cosseno sejam zero. Então

$$\begin{aligned} -\alpha k^2 + V_0 + \beta \omega \gamma &= 0 \\ -\alpha k^2 + V_0 &= -\beta \gamma \omega \end{aligned} \quad (1.6)$$

e

$$\begin{aligned} -\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma - \beta \omega &= 0 \\ -\alpha k^2 + V_0 &= \frac{-\beta \omega}{\gamma} \end{aligned} \quad (1.7)$$

com isto tem-se três equações algébricas para serem satisfeitas, (1.1), (1.6) e (1.7), e três constantes, α , β e γ , para operacionalizar. Somando (1.7) a (1.6) obtém-se:

$$\begin{aligned} 0 &= -\beta \gamma \omega - \frac{\beta \omega}{\gamma} \\ \gamma &= \frac{-1}{\gamma} \\ \gamma^2 &= -1 \\ \gamma &= \pm \sqrt{-1} \equiv \pm i \end{aligned}$$

onde i é o número imaginário. Substituindo este resultado em (1.6), tem-se:

$$-\alpha k^2 + V_0 \equiv \pm i \beta \omega$$

comparando-se com (1.1),

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar \omega$$

obtém-se que:

$$\alpha = \frac{-\hbar^2}{2m}$$

$$\pm i\beta = \hbar \text{ ou}$$

$$\hbar = \pm i\beta (-i) \Rightarrow i\hbar = i(\pm i)\beta \Rightarrow i\hbar = \pm i^2\beta \Rightarrow i\hbar = \pm(-1)\beta \Rightarrow \beta = \pm i\hbar$$

Seguindo o convencional, escolhe-se o sinal positivo ⁶, logo $\beta = +i\hbar$. Pode-se então determinar todas as constantes na forma suposta para a equação diferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1.8)$$

Esta equação satisfaz todas as hipóteses iniciais relativas à equação de onda da mecânica quântica, [15]. O resultado a que se chegou é um caso especial: o caso de uma partícula livre, onde $V(x, t) = V_0$, uma constante. Erwin Schrödinger propôs esta equação ⁷ e postulou que teria a mesma forma no caso geral em que a energia potencial $V(x, t)$ varia como função de x e t ⁸. Pode-se afirmar, no entanto, que a equação de onda de Schrödinger, dentro de certas aproximações e satisfeita por um pacote de ondas, descreve uma partícula deslocando-se livremente. Para uma partícula de momento p e energia cinética $p^2/2m$, as equações de de Broglie fornecem:

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{ikx - i\omega(k)t} \quad (1.9)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{p}{m} &= \frac{d\omega}{dk} \\ E &= \hbar\omega \end{aligned}$$

⁶ A escolha do sinal não é significativa, pois sua consequência em nada altera o resultado final.

⁷ Conforme Gleiser, Schrödinger formulou sua teoria em seis manuscritos, 1926, por meio de argumentação filosófica e exotérica.

⁸ A força não é nula. A validade do postulado deve ser julgada pela comparação de suas implicações com as experiências realizadas.

de modo que

$$\omega = \frac{p^2}{2 m \hbar}$$

Então pode-se reescrever (1.9) em termos de p

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{i(px - Et)/\hbar}$$

então o pacote de ondas $\Psi(x, t)$ é uma solução geral da equação diferencial parcial

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) E e^{i(px - Et)/\hbar} \\ i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) \frac{p^2}{2 m} e^{i(px - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar} \end{aligned} \quad (1.10)$$

que é a solução mais geral da equação (1.8), [18]. Pode-se notar que a equação é de primeira ordem na derivada temporal, ou seja, uma vez dado o valor inicial de Ψ , $\Psi(x, 0)$, todos os seus outros valores podem ser determinados, em qualquer instante. Basta observar a equação de outra forma:

$$\Psi(x, t + \partial t) = \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2 m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \partial t$$

ou ainda

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar}$$

Mais uma vez pode-se reiterar a importância da *equação de Schrödinger* - uma forma de entender, matematicamente, a complexa estrutura do chamado *micro-Universo* e consequentemente desvendar os problemas do *macro-Universo*. Tenta-se, atualmente, uma teoria unificada da física que explique todos os fenômenos do Universo. Para tanto será necessário incluir a mecânica quântica na base de outra grande corrente, a física relativística, para que se superem as incompatibilidades. Ademais, a *equação de Schrödinger* é ferramenta básica para a modelagem de novos componentes eletrônicos que trabalhem com emissão e recepção de ondas através de microestruturas, condutores e semicondutores; além de muitas outras aplicações na engenharia que tratam as ondas, não mais na forma da mecânica clássica, mas na forma de *pacotes de energia*.

1.2 A equação de Schrödinger independente do tempo

O estudo de novos materiais pela química e pela física trouxe nova dimensão

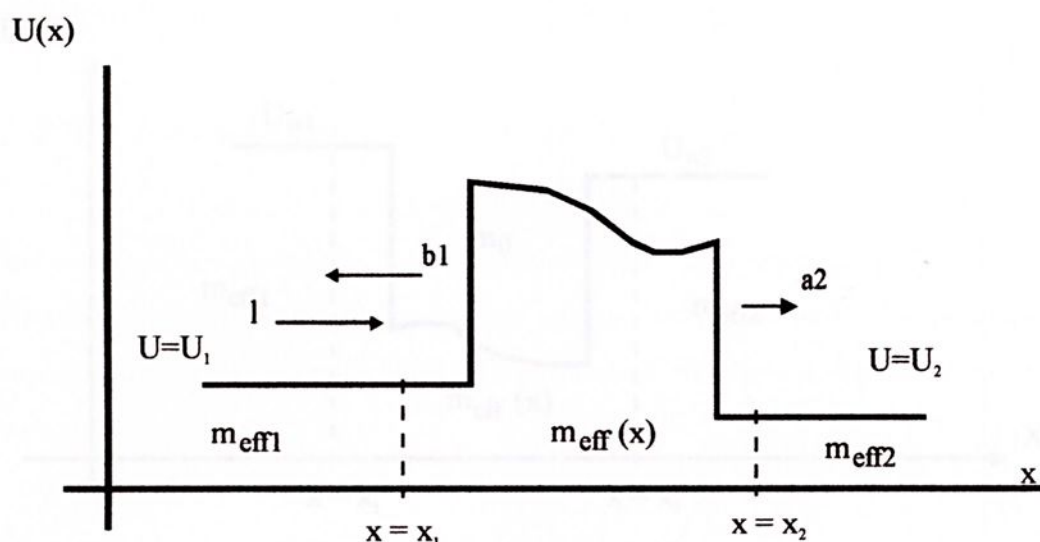


Figura 1.2.1: Barreira de potencial arbitrária.

para a interpretação teórica dos fenômenos. Alguns, não explicáveis pela física clássica, tiveram sua interpretação pela física quântica. Um exemplo é o caso dos *semicondutores*. Estes dispositivos eletrônicos são constituídos de materiais e substâncias cuja principal característica é de permitir a passagem de corrente elétrica em um sentido e opor-se à passagem da corrente elétrica no sentido contrário. Estas estruturas têm atraído muita atenção por suas propriedades eletrônicas e optoeletrônicas. As propriedades quânticas destas estruturas são, em princípio, obtidas pela solução da equação de Schrödinger para uma função envoltória sobre uma aproximação de massa efetiva dos elétrons. Em termos de modelo para estudo quântico, pode-se interpretar o fenômeno como uma *barreira de potencial* - um “muro” que os elétrons não podem transpor (figura 1.2.1), ou como um *poço de potencial* - um “buraco” que impede a passagem dos elétrons (figura 1.2.2)

O poço de potencial é frequentemente utilizado na mecânica quântica para representar uma situação na qual uma partícula se move em uma região limitada do espaço sob a influência de forças que a mantêm nessa região. Apesar do modelo perder alguns detalhes do movimento, ele contém a característica básica de limitar a partícula a uma região de tamanho determinado. Quando o potencial é constante ou linear em uma região, a equação de Schrödinger pode ser resolvida analiticamente. No entanto, quando se considera um potencial de contorno arbitrário, a equação de Schrödinger deverá ser resolvida através de

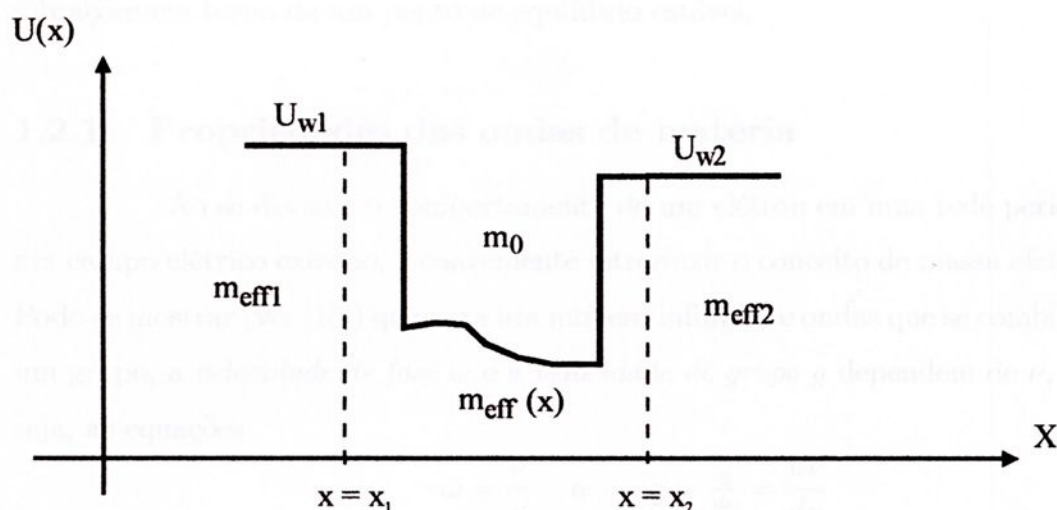


Figura 1.2.2: Poço de potencial arbitrário

métodos numéricos. Métodos numéricos baseados em aproximação por múltiplos passos, aproximação de potencial por pedaços lineares, por analogia à linhas de transmissão têm sido desenvolvidos com sucesso para análise de poços de potencial com potencial de contorno arbitrário. Também o Método dos Elementos Finitos tem se mostrado muito eficiente para esse tipo de problema, principalmente quando o problema aborda um funcional ou quando também trata de sistemas dissipativos ou não lineares ([25], [32], etc).

No caso da barreira de potencial, no entanto, na medição do fenômeno físico para alguns valores de potencial, nota-se uma emissão após a barreira. Um exemplo recente de penetração de barreira é encontrado no diodo túnel, que é um componente semiconductor (transistor) utilizado em circuitos eletrônicos rápidos (resposta em alta frequência é melhor que dos outros transistores). Ainda pode-se encontrar discrepância para o poço de potencial. Para a engenharia, este fenômeno deve ser equacionado para minorar custos de produção, e para a física matemática deve ser estudado de forma a se chegar em um modelo de previsão/interpretação satisfatório. Para estes casos, a equação de Schrödinger é uma ferramenta da mecânica quântica que atende ao problema.

Um outro estudo de interesse é o do oscilador harmônico simples. O oscilador harmônico simples é de muita importância para a física pois é o protótipo de qualquer sistema que envolva oscilações. De forma geral, o oscilador harmônico pode ser utilizado para descrever quase todos os sistemas nos quais uma partícula está executando pequenas

vibrações em torno de um ponto de equilíbrio estável.

1.2.1 Propriedades das ondas de matéria

Ao se discutir o comportamento de um elétron em uma rede periódica sujeito a um campo elétrico externo, é conveniente introduzir o conceito de massa efetiva do elétron. Pode-se mostrar (ver [15]) que para um número infinito de ondas que se combinam formando um grupo, a *velocidade de fase* ω e a *velocidade de grupo* g dependem de ν , κ e $d\nu/d\kappa$, ou seja, as equações

$$\omega = \frac{\nu}{\kappa} \quad \text{e} \quad g = \frac{\frac{d\nu}{d\kappa}}{\frac{d\kappa}{d\kappa}} = \frac{d\nu}{d\kappa}$$

têm validade geral. Das relações de Einstein e de Bröglie

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{E}{h} & \text{e} & \quad \kappa \equiv \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h} \\ \text{e} \quad d\nu &= \frac{dE}{h} & \text{e} & \quad d\kappa = \frac{dp}{h} \end{aligned}$$

Então, a velocidade de grupo g do grupo de ondas de matéria associado com uma partícula em movimento é dada por

$$g = \frac{d\nu}{d\kappa} = \frac{dE}{dp} \quad (1.11)$$

fazendo

$$E = \frac{mv^2}{2} \quad \text{e} \quad p = mv$$

obtem-se

$$\frac{dE}{dp} = \frac{mv \, dv}{m \, dv} = v$$

ou seja, $g = v$, a *velocidade do grupo de ondas de matéria é exatamente igual à velocidade da partícula cujo movimento ele governa*. Conforme 1.11 a velocidade g de um grupo de ondas é igual à derivada da frequência ν de suas ondas progressivas senoidais componentes em relação ao recíproco do comprimento de onda κ , isto é

$$g = \frac{d\nu}{d\kappa} = \frac{d\omega}{d\kappa}$$

Multiplicando-se e dividindo-se $d\nu/d\kappa$ por 2π , ν transforma-se em frequência angular ω e κ no número de onda angular ou vetor de onda κ . Aplicando-se ao caso simples do elétron livre com energia

$$\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = \hbar \omega$$

que vem da relação Einstein de Bröglie $\mathcal{E} = h\nu = \hbar\omega$. Calculando-se $d\omega/d\kappa$ a partir da



última expressão, tem-se

$$g = \frac{d\omega}{d\kappa} = \frac{\hbar 2\kappa}{2m} = \frac{\hbar \kappa}{m} = \frac{p}{m} = \frac{m\nu}{m} = v$$

ou seja, que a velocidade do grupo é igual à do elétron. Quando do deslocamento de um elétron em uma rede cristalina sujeito a um campo externo, durante um intervalo de tempo dt o elétron de carga q percorre uma distância dx , e o trabalho realizado pelo campo externo E será a força aplicada, qE , multiplicada pelo deslocamento, dx . Mas isso é igual à amplitude da variação $d\mathcal{E}$ da energia do elétron

$$d\mathcal{E} = qE dx = qE \frac{dx}{dt} dt = qE v dt$$

mas, $\mathcal{E} = \hbar\omega$, então

$$d\mathcal{E} = \hbar d\omega = \hbar \frac{d\omega}{d\kappa} d\kappa = \hbar g d\kappa$$

ou seja,

$$qE v dt = \hbar g d\kappa$$

$$qE dt = \hbar d\kappa$$

$$qE = \hbar \frac{d\kappa}{dt}$$

Tomando a derivada temporal de g

$$\begin{aligned} g &= \frac{d\omega}{d\kappa} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{d\kappa} \\ \frac{dg}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\mathcal{E}}{d\kappa dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\mathcal{E}}{d\kappa^2} \frac{d\kappa}{dt} \\ \frac{dg}{dt} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}}{d\kappa^2} qE \end{aligned}$$

chamando

$$\frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}}{d\kappa^2}$$

pode-se reescrever

$$\frac{dv}{dt} = \frac{qE}{m^*}$$

onde as propriedades da rede cristalina determinam $1/m^*$, onde m^* é a massa efetiva..

1.2.2 Equações básicas

Considere-se um poço de potencial ou uma barreira de potencial com um po-



tencial arbitrário $U(x)$ em uma região $x_1 < x < x_2$. Tomando-se a massa efetiva de aproximação, a função de contorno ϕ de um elétron no sistema é dada pela equação de Schrödinger uni-dimensional independente do tempo

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m_{eff}} \frac{d\phi}{dx} \right) - U \phi + E \phi = 0 \quad (1.12)$$

com $\hbar = h/2\pi$, onde m_{eff} é a massa efetiva, E é a energia do elétron e h é a constante de Plank. A constante de Plank h vale

$$h = 4,136 \times 10^{-15} \text{ eV.s} \quad \text{ou} \quad h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Formulação do Método dos Elementos Finitos (MEF) e sua aplicação na solução da equação de Schrödinger.

O Método dos Elementos Finitos (MEF) tem se estruturado importante ferramenta para análise numérica e é utilizado por engenheiros há algum tempo. A única grande saber o termo é muito utilizado várias proposições de aplicação do elemento finito. De modo de vista da matemática o método dos elementos finitos é baseado em uma formulação integral, diferentemente do método de diferenças finitas que é baseado em diferenciais.

2.1 Fundamentos para aplicação do Método dos Elementos Finitos.

Conforme HINTON [23], atualmente as formulações integrais do método dos elementos finitos são obtidas de duas formas: *formulação variacional* e *formulação de resíduos ponderados*. As técnicas variacionais são ainda muito importantes para o desenvolvimento de elementos finitos a solução de problemas de engenharia nas áreas de mecânica e análise de stress. Modelos variacionais envolvem a descoberta de parâmetros nodais produzindo valores (máximo e mínimo) estáveis por meio de uma relação integral exponencial conhecida como funcional. Muitos problemas de física possuem formulações variacionais que resultam em

Capítulo 2

Formulação do Método dos Elementos Finitos (MEF) e sua aplicação na solução da equação de Schrödinger.

O Método dos Elementos Finitos (MEF) tem se mostrado uma importante ferramenta para análise numérica e é utilizado pela engenharia já há algum tempo. A bibliografia sobre o tema é vasta e abrange vários procedimentos de aplicação de elementos finitos. Do ponto de vista da matemática o método dos elementos finitos é baseado em uma formulação integral, diferentemente do método de diferenças finitas que é baseado em diferenciais.

2.1 Fundamentos para aplicação do Método dos Elementos Finitos.

Conforme HINTON [23], atualmente as formulações integrais do método dos elementos finitos são obtidas de duas formas: *formulação variacional* e *formulação de resíduos ponderados*. As técnicas variacionais são ainda muito importantes para o desenvolvimento de elementos finitos e solução de problemas de engenharia nas áreas de mecânica e análise de stress. Modelos variacionais envolvem a descoberta de parâmetros nodais produzindo valores (máximo e mínimo) estacionários de uma relação integral específica conhecida como funcional. Muitos problemas da física possuem formulações variacionais que resultam em

formas quadráticas produzindo um sistema de equações algébricas simétricas e positivo definidas. Uma outra importante vantagem prática da formulação variacional é que frequentemente tem-se teoremas dos erros de borda ou fronteira.

Uma solução que produz um valor estacionário da integral funcional e satisfaz as condições de fronteira é equivalente a uma solução da equação diferencial associada, conhecida como equação de Euler-Lagrange. Se o funcional for conhecido, então é relativamente fácil encontrar a equação de Euler-Lagrange correspondente, no entanto na maioria dos problemas da engenharia ou da física, estes são inicialmente definidos em termos de equações diferenciais. Como o método dos elementos finitos requer uma formulação integral, tem-se que procurar um funcional que tenha uma correspondente equação de Euler-Lagrange para uma dada equação diferencial e respectivas condições de contorno. Normalmente isto é muito difícil, mas pode-se gerar uma formulação integral para a equação diferencial original através de técnicas de resíduos ponderados.

A geração dos modelos de elementos finitos com a utilização das técnicas de resíduos ponderados é muito importante para a solução de equações diferenciais e outras aplicações não estruturais. O método dos resíduos ponderados começa com a equação diferencial que o governa

$$L(\phi) = Q$$

e, a partir dela, procura-se uma relação variacional matematicamente equivalente. Geralmente adota-se uma solução aproximada, chamada ϕ^* , e substitui-se esta solução na equação diferencial. Como é uma aproximação, existe um erro residual na equação diferencial

$$L(\phi^*) - Q = \varepsilon.$$

Embora não se possa forçar o termo residual a desaparecer, é possível forçar uma integral ponderada, sobre o domínio da solução, a anular o resíduo; ou seja, a integral sobre o domínio da solução, Ω , do produto do termo residual e uma função de ponderação, é zero,

$$I = \int_{\Omega} RW d\Omega = 0$$

Substituindo as funções de interpolação da solução aproximada, ϕ^* , e a função de ponderação, W , resulta um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas por

um coeficiente desconhecido da solução aproximada. A escolha da função de ponderação define o tipo de técnica de resíduo ponderado a ser utilizada. Para obter-se o critério de Galerkin, é necessário impor que

$$W = \phi^*$$

enquanto para critério quadrático

$$W = \frac{\partial R}{\partial \phi^*}$$

Para ambas as formulações, variacional e resíduos ponderados, as seguintes restrições são geralmente aceitas de forma a estabilizar a convergência do modelo de elementos finitos:

1. As funções de interpolação do elemento devem ser capazes de modelar algum valor constante da variável dependente ou de suas derivadas, no limite quando o tamanho do elemento decresce.
2. As funções de forma do elemento deverão ser escolhidas tal que, nas interfaces dos elementos, a variável dependente e suas derivadas sejam contínuas.

2.1.1 Preliminares matemáticas

Considere-se um problema de valor de contorno de dois pontos [9]:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = f \quad \text{em} \quad (0, 1) \quad (2.1)$$

$$u(0) = 0, \quad u'(1) = 0$$

Se u é solução e v é uma função (suficientemente regular) tal que $v(0) = 0$, então a integração por partes produz:

$$(f, v) = \int_0^1 f(x) v(x) dx = \int_0^1 -u''(x) v(x) dx \quad (2.2)$$

$$= \int_0^1 u'(x) v'(x) dx = a(u, v)$$

e defina-se

$$v = \{v \in L^2(0, 1) : a(v, u) < \infty \text{ e } v(0) = 0\} \quad (2.3)$$



então a solução u para (2.1) é caracterizada por $u \in V / a(u, u) = f(v) \forall v \in V$, que é chamada de *formulação variacional* de (2.1). A relação é chamada *variacional* porque a função v pode sofrer variações arbitrárias, o que é aparentemente não usual, mas tem uma interpretação natural através dos espaços de Hilbert⁹. Um exemplo de um espaço de Hilbert é $L^2(0, 1)$ com produto interno $(\cdot, \cdot)$, embora isso não seja óbvio, o espaço V pode ser visto como um espaço de Hilbert com produto interno $a(\cdot, \cdot)$ definido em (2.2)¹⁰. O resultado central é que a solução (2.3) ainda incorpora o problema original, verificado através do seguinte teorema, com algumas restrições:

Teorema 2.1.1 *Suponha $f \in C^0([0, 1])$ e $u \in C^2([0, 1])$ satisfazendo (2.3). Então u é solução de (2.1).*

Prova: Seja $v \in V \cap C^1([0, 1])$. Integrando por partes,

$$(f, v) = a(u, v) = \int_0^1 (-u'') v \, dx + u'(1) v(1) \quad (2.4)$$

então $(f - (-u''), v) = 0$ para todo $v \in V \cap C^1([0, 1])$ tal que $v(1) = 0$. Seja $w = f + u''$ e $C^0([0, 1])$. Se $w \not\equiv 0$, então $w(x)$ é um dos "sinais" de algum intervalo $[x_0, x_1] \subset [0, 1]$, com $x_0 < x_1$ (contínuo). Escolha-se $v(x) = (x - x_0)^2$ em $[x_0, x_1]$ e $v \equiv 0$ externo a $[x_0, x_1]$. Mas, então $(w, v) \neq 0$, o que é uma contradição e ainda, $-u'' = f$. Aplicando $v(x) = x$ em (2.4), encontra-se $u'(1) = 0$, logo $u \in V$, o que implica $u(0) = 0$, portanto u resolve (2.1) ■

A condição de contorno $u(0) = 0$ é chamada condição essencial na formulação variacional explícita, isto é, na definição de V . Este tipo de condição de fronteira leva o nome de condição de *DIRICHLET* e a condição $u'(1) = 0$ é chamada *NATURAL* ou *NEUMANN*, porque está incorporada implicitamente. Resumidamente,

As suposições $f \in C^0([0, 1])$ e $u \in C^2([0, 1])$ no teorema 2.1.1 podem ser interpretadas como senso comum. No entanto, pode-se escolher outros caminhos para interpretação e o teorema 2.1.1 mostra que a formulação (2.3) é um caminho de interpretação válido com

⁹ Um espaço de Hilbert é um espaço vetorial que, topologicamente, é definido utilizando-se um produto interno.

¹⁰ Uma questão que aparece então é: a derivada a ser usada na definição da forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ poderia ser a clássica derivada

$$u'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h},$$

ou deveria ser alguma outra definição válida para funções ou variação de contornos? Esta questão é respondida através dos espaços de Sobolev.

Condição de contorno	Nome variacional	Nome próprio
$u(x) = 0$	essencial	Dirichlet
$u'(x) = 0$	natural	Neumann

Tabela 2.1.1: Condições e nomes

poucas suposições restritivas em f . Por esta razão é também chamada de suposição fraca.

Para problemas gerais em $\mathbb{R}^3$ em *regime estacionário*, considerando-se meio *isotrópico* (igual em todas as direções) e *homogêneo* (mesmo material), o regime é caracterizado, normalmente, por uma função $u(x, y, z)$ que é solução da equação de Poisson

$$\Delta u = \nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f(x, y, z)$$

em um domínio G . Em uma parte Γ_1 da superfície de contorno Γ , $u(x, y, z)$ satisfaz a condição de contorno de Dirichlet:

$$u(x, y, z) = \phi(x, y, z) \text{ em } \Gamma_1$$

onde $\phi(x, y, z)$ é dada em Γ_1 . Na parte restante do contorno, Γ_2 , $u(x, y, z)$ satisfaz a condição geral de contorno de Cauchy:

$$\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha(x, y, z) u(x, y, z) = \gamma(x, y, z) \text{ em } \Gamma_2$$

Note-se que $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$, e $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$. Este é o típico problema de valor elíptico com condições de contorno mistas do tipo Dirichlet e Neumann, ou seja de Cauchy.

Nesse caso, conhece-se a condição de contorno em uma região de fronteira (condição de Dirichlet), conhece-se a derivada normal em uma parte da fronteira (condição de Neumann). Resumindo, um problema típico em regime estacionário tem como solução uma função a duas ou três variáveis que satisfaz uma equação diferencial parcial do tipo elíptico, juntamente com certas condições de contorno, tais como: distribuição de temperatura em problemas de condução de calor; cálculo de intensidade de campo em problemas de eletrostática; cálculo de velocidades e linhas de corrente em problemas de escoamento de fluidos (sem vórtex); cálculo de esforços em problemas que envolvem trações (elasticidade); cálculo de infiltrações em regime estacionário através de um meio poroso; etc¹¹.

¹¹ Notas de aula do curso *Método dos Elementos Finitos - uma abordagem matemática e computacional*.



Para os casos de problemas com *dependência temporal* (regime não estacionário), a equação de Poisson, ou uma equação de segunda ordem generalizada, é combinada com derivadas temporais da função requerida, que agora é da forma $u = u(x, t)$. Se houver a limitação a duas dimensões por simplicidade, obtem-se uma equação diferencial parcial geral da forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f(x, y, t) + k \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

onde os coeficientes k e u são funções do tempo e espaço, não negativas. Além das condições de contorno, tem-se também condições iniciais para um dado instante t_0 . Essas equações podem ser classificadas em três categorias, dependendo dos valores de k e u :

1 - $k \neq 0$, $u = 0 \Rightarrow$ equação do tipo *parabólico* que descrevem fenômenos como fluxo de calor não estacionário; processos de difusão (corantes em vidro em fusão, por exemplo) não estacionários; etc. Equações desse tipo são conhecidas como *equações de difusão* com condição inicial $u(x, y, t_0) = \Psi(x, y)$

2 - $k = 0$, $u \neq 0$ e $f(x, y, t) = 0 \Rightarrow$ são equações do tipo *hiperbólico*, descrevem problemas de vibrações (oscilações) para os quais, quase sempre, as soluções de interesse são periódicas. Fenômenos associados a esse tipo de modelo são: vibrações acústicas em espaços fechados; propagação de ondas eletromagnéticas em dielétricos; ondas oscilando livremente em meio aquoso; etc. Impondo-se uma solução periódica do tipo $u(x, y, t) = u(x, y) e^{i \omega t}$ (separação de variáveis) e substituindo-a na equação geral para o caso $k = 0$, $u \neq 0$, obtem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_1 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \omega^2 \mu u = 0$$

que é chamada *equação de Helmholtz*. Originariamente, a equação de Helmholtz está associada com a propagação do som no ar e relaciona oscilações rápidas da densidade do ar e da pressão em torno de certos valores médios ρ_0 e p_0 . Essas mudanças são causadas pelo movimento oscilatório coletivo das moléculas de ar, descrito por suas velocidades macroscópicas¹².

Não há condições iniciais devido à eliminação da dependência temporal, mas restam as condições de contorno. Este é um problema de autovalores (autovetores) e au-

Prof Dr. José Márcio Machado - IBILCE - UNESP

¹² Velocidade estatística resultante de um pequeno grupo de moléculas, mas ainda assim contendo milhões de moléculas. Ver BUTKOV, 323.



tofunções: as soluções para ω são as autofrequências, e $u(x, y)$ são as autofunções correspondentes. A equação de Helmholtz é muito utilizada em problemas de estados quânticos, guias de transmissão de ondas eletromagnéticas e cavidades ressonantes para microondas.

$3 - k \neq 0, u \neq 0 \Rightarrow$ neste caso uma equação de onda amortecida aparece devido à presença de derivadas de segunda ordem no tempo, e as condições iniciais serão duas: $u(x, y, t_0) = \Psi(x, y)$ e $\frac{\partial u}{\partial t}(x, y, t_0) = X(x, y)$. Essas equações descrevem fenômenos como comportamento de estruturas elásticas, escoamento de fluidos, etc.

Para problemas em regime estacionário ou problemas em regime não estacionário mas sem dependência temporal explícita, como no caso da equação de Helmholtz, a solução da equação diferencial parcial correspondente é calculada por meio de uma integral adequadamente construída que assume um valor mínimo estacionário para a solução da equação diferencial parcial, ou seja, o problema se transforma em encontrar uma função $u(x, y)$ que minimiza uma dada expressão integral (funcional).

Teorema 2.1.2 *Admita-se uma região G limitada no plano (x, y) com contorno fronteiro C , que pode ser composto por muitas curvas contínuas se G não for simplesmente conexa. Sejam $k_1(x, y)$, $k_2(x, y)$, $\rho(x, y)$ e $F(x, y)$ funções dadas no região G , e $\alpha(S)$ e $\gamma(s)$ funções dos segmentos da fronteira C . A função $u(x, y)$ que torna a expressão integral*

$$I = \iint_G \left[\frac{1}{2} \left(\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]^2 k_1(x, y) + \left[\frac{\partial u}{\partial y} \right]^2 k_2(x, y) \right) - \frac{1}{2} \rho(x, y) u^2 + f(x, y) u \right] dx dy + \oint_C \left[\frac{1}{2} \alpha(s) u^2 - \gamma(s) u \right] ds \quad (2.5)$$

estacionária sob a condição associada $u = \Phi(S)$ em C_1 , onde C_1 é um segmento de fronteira G , é necessariamente uma solução do problema de valores de contorno

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \rho(x, y) u = f(x, y) \text{ em } G,$$

sob a condição de Dirichlet $u = \Phi(S)$ em C_1 , e a condição geral de Cauchy

$$k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} n_x + k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} n_y + \alpha(S) u = \gamma(S) \text{ em } C_2, \quad C_1 \cup C_2 = C \text{ e } C_1 \cap C_2 = \emptyset.$$

Prova: Do cálculo variacional vem que a primeira variação de uma expressão funcional vale zero quando ela assume um valor estacionário para $u(x, y)$. A primeira

variação de I (2.1.2) é

$$\delta I = \int \int_G \left[k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \delta \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right] + k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \delta \left[\frac{\partial u}{\partial y} \right] - \rho(x, y) u \delta u \right] + \oint_C [\alpha(s) u \delta u - \gamma(s) \delta u] ds \quad (2.6)$$

Aplicando a fórmula integral de Gauss na expressão (2.6) tem-se

$$\int \int_G \nu(x, y) \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) dx dy = \oint_C \nu(x, y) u(x, y) n_x ds - \int \int_G \frac{\partial \nu}{\partial x} u dx dy$$

Integrando (2.6) por partes tem-se

$$0 = \delta I = \int \int_G \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left[k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right] - \rho(x, y) u + f(x, y) \right] \delta u dx dy + \oint_C \left[k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} n_x + k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} n_y + \alpha(S) u - \gamma(S) \right] \delta u ds$$

portanto, a variação somente se anula quando

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial x} \left[k_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[k_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \rho(x, y) u = f(x, y) \quad \text{em } G \\ 2) \quad & k_1 \frac{\partial u}{\partial x} n_x + k_2 \frac{\partial u}{\partial y} n_y + \alpha(S) u = \gamma(S) \quad \text{em } C_2 \text{ se } C_2 \text{ for não vazia.} \end{aligned}$$

isto prova a equivalência procurada. ■

A condição 2 está implícita na formulação variacional. A solução $u(x, y)$ satisfaz as condições de contorno gerais de Cauchy e apenas as condições de Dirichlet devem ser consideradas na formulação variacional. Por isso são conhecidas como essenciais. Ainda, para problemas mais complexos, pode ser conveniente escrever a integral I baseada em critérios físicos, como a formulação lagrangeana da mecânica clássica (aplicação do cálculo variacional) ou somente considerar que a energia potencial total de um sistema possui um mínimo.

Em muitos casos, não é possível encontrar uma expressão funcional adequada para um problema. Para esses casos resta o recurso de outros métodos, por exemplo, os métodos de Galerkin e Ritz-Galerkin.

Aparentemente não é vantagem trocar um problema proposto na forma diferencial por outro, o de encontrar o valor que minimiza uma expressão funcional (integral) maior e mais complexa que a equação diferencial parcial inicial. Ocorre que, na prática, existem métodos construtivos muito cômodos para implementação em computador capazes

de determinar uma solução apropriada e aproximada para o problema na forma integral.

2.1.2 O método de RITZ clássico

O método de Ritz encontra uma solução aproximada para a integral. Supõe-se de início que a função procurada $u(x, y)$ pode ser escrita como

$$u(x, y) = \Phi_0(x, y) + \sum_{k=1}^m C_k \Phi_k(x, y)$$

onde o conjunto de funções linearmente independentes $\Phi_0(x, y)$, $\Phi_1(x, y)$, $\Phi_3(x, y)$, ... , $\Phi_m(x, y)$ é escolhido de modo a satisfazer as condições de contorno impostas para $u(x, y)$. Os coeficientes C_k desta expansão são incógnitas a determinar. Para encontrá-las há que substituir a expansão acima na expressão funcional, que integrada nas regiões G e C passa a ser função dos C_k apenas. Uma condição necessária para que o funcional tenha um valor estacionário é que as derivadas $\frac{\partial I}{\partial C_k}$, $k = 1, 2, 3, \dots, m$ sejam todas zero. Dessa condição saem então as equações para determinar os C_k . Dessa forma tem-se um sistema de equações lineares, homogêneo e que apresenta pelo menos uma solução não trivial para C_k de modo que o problema se transforma em um problema de autovalores, nos casos em que a funcional relacionar com uma equação do tipo Helmholtz, onda amortecida, etc. O sistema pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix}$$

Dentre as limitações do método de Ritz a mais importante é que o método só é aplicável a regiões limitadas por formas geométricas simples. Para regiões com um contorno complicado é impossível escolher funções $\phi_i(x, y)$ que satisfaçam as condições iniciais de contorno. Pode-se afirmar que a idéia básica do método de Ritz foi modificada para se tornar o método dos elementos finitos.

2.1.3 O método de GALERKIN

O método de Galerkin é um desdobramento do *método dos resíduos ponderados*. De modo análogo ao método de Ritz, no método dos resíduos ponderados, a solução $u(x, y)$



procurada para uma dada equação diferencial parcial

$$u(x, y) = \Phi_0(x, y) + \sum_{k=1}^m C_k \Phi_k(x, y)$$

onde Φ_0 satisfaz as eventuais condições de contorno não homogêneas, e as Φ_k restantes satisfazem as condições de contorno homogêneas.

O primeiro passo é substituir $u(x, y)$ diretamente na equação diferencial parcial que será satisfeita apenas aproximadamente, havendo um resíduo $R(x, y)$.

O segundo passo é ponderar a integral desse resíduo por um conjunto de funções w_i , e impor a integral como sendo nula sobre a região de interesse. Essa é a condição para se obter os sistemas de equações que resolvem os C_k 's no método dos resíduos ponderados.

No método de Galerkin, faz-se $w_i = \Phi_i$, ou seja, as funções peso são as mesmas usadas para expandir a solução. Dessa forma, no método de Galerkin, partindo-se diretamente da equação diferencial parcial, a condição para obter os coeficientes de expansão é obtida impondo-se que a integral dos resíduos é nula na região de interesse; enquanto no método de Ritz, partindo-se da integral da expressão funcional, não há integração de resíduos e a condição para obtenção dos coeficientes da expressão é a condição de existência de valor estacionário para a integral do funcional. Assim, o método de Galerkin permite tratar problemas para os quais não é possível uma formulação variacional.

No método dos elementos finitos, toma-se a hipótese de que as funções $\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_m$ satisfazem as condições dadas, mas não são exibidas explicitamente, e usando o método de Galerkin decompõe-se a região G de interesse em um problema de tal forma que seja possível exibir um mesmo tipo de funções de aproximação, automatizando o processo.

2.1.4 Aproximação RITZ-GALERKIN

Seja $S \subset V$ um subespaço finito. Considere a formulação (2.3) e substituindo V por S ,

$$u_s \in S / a(u_s, v) = (f, v) \quad \forall v \in S \quad (2.7)$$

Um dos aspectos poderosos do método de RITZ-GALERKIN é a facilidade com que um esquema discreto de aproximação para (2.1) pode ser definido. No entanto, deve-se observar que (2.7) define um objeto. O processo indicado na formulação (2.7) representa

um sistema (quadrado, finito) de equações para u_s , conforme o seguinte teorema:

Teorema 2.1.3 Dado $f \in L^2(0,1)$, (2.7) tem uma única solução.

Prova: Escreva-se (2.7) em termos das bases $\{\phi_i : 1 \leq i \leq n\}$ de S . Seja $u_s = \sum_{j=1}^n U_j \phi_j$; seja $K_{ij} = a(\phi_j, \phi_i)$ e $F_i = (f, \phi_i)$ para $i, j = 1, 2, 3, \dots, n$. Fixe-se $\mathbf{U} = (U_j)$, $\mathbf{K} = (K_{ij})$ e $\mathbf{F} = (F_i)$. Então (2.7) é equivalente a resolução de uma matriz quadrada

$$\mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{F} \quad (2.8)$$

Para um sistema quadrado como (2.8) sabe-se que para existência de solução é necessário que seja um sistema de dimensão finita. Uma solução não única implicaria em $\mathbf{V} \neq 0 / \mathbf{K} \mathbf{V} = 0$. Escrevendo $v = \sum V_j \phi_j$, lembrando que a equivalência de (2.7) e (2.8) implica em $a(v, \phi_j)$ para todo j , multiplicando por V_j e somando com o produto $0 = a(v, v) = \int_0^1 (v')^2(x) dx$, conclui-se que $v' \equiv 0$. Ainda, se v é constante e $v \in S \subset V$ implica que $v = 0$ ¹³. Ainda, $\{\phi_i : 1 \leq i \leq n\}$ é uma base de S , o que significa que $\mathbf{V} = 0$. Então a solução para (2.8) deve existir e ser única. ■

A matriz $\mathbf{K}$ é conhecida como *matriz de rigidez*. Esse nome vem das matrizes semelhantes utilizadas no contexto de problemas de cálculo de estruturas. São simétricas; o produto interno da energia $a(\cdot, \cdot)$ é simétrico; e também são *positivas definidas*:

$$\sum_{i,j=1}^n k_{ij} v_i v_j = a(v, v), \quad \text{onde} \quad v = \sum_{j=1}^n v_j \phi_j$$

com $a(v, v) \geq 0$ para todo (v_j) e $a(v, v) = 0$, e como já mostrado, isto implica $v \equiv 0$ conforme teorema 2.1.3.

2.1.5 Espaços Polinomiais Discretos - O Método dos Elementos Finitos

Seja $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = 1$ uma partição de $[0, 1]$ e seja S um espaço linear de funções v tal que

i) $v \in C^0([0, 1])$

ii) $v|_{[x_{i-1}, x_i]}$ é um polinômio linear, $i = 1, \dots, n$, e

¹³ Estas duas afirmações partem do princípio que $\mathbf{V}$ é um espaço de *Sobolev* e problemas como a função v ser de Cantor e ser candidata a solução de equações diferenciais podem ser excluídos.

iii) $v(0) = 0$.

Para cada $i = 1, \dots, n$ define-se ϕ_i de modo que $\phi_i(x_j) = \delta_{ij} = \text{delta de Kronecker}$, como mostrado na figura(2.1.1)

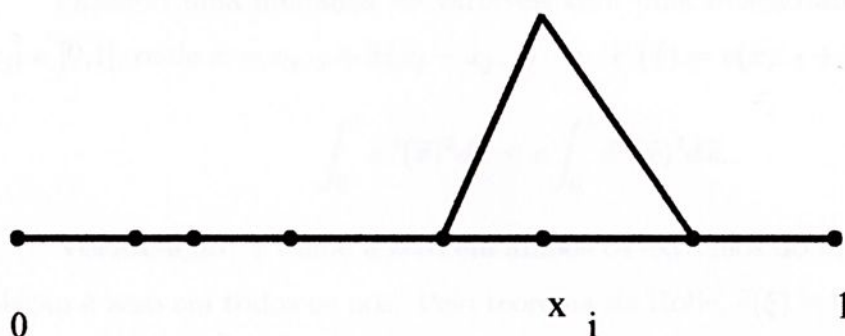


Figura 2.1.1: Função base - delta de Kronecker

Lema 2.1.1 $\{\phi_i : 1 \leq i \leq n\}$ é uma base de S . Nota: os pontos $\{x_i\}$ são chamados nós, $\{\phi_i\}$ é chamado de base nodal de S , e $\{v(x_i)\}$ são os valores nodais da função v .

Prova: O conjunto $\{\phi_i\}$ é linearmente independente desde que $\sum_{i=1}^n c_i \phi_i(x_j) = 0$ implica $c_j = 0$. O conjunto $\{\phi_i\}$ é uma base de S pois, dado $v \in C^0([0, 1])$, o interpolante $v_I \in S$ se v é determinado por $v_i = \sum_{i=1}^n v(x_i) \phi_i$. ■

Lema 2.1.2 $v \in S \implies v = v_I$

Prova: $v - v_I$ é linear para cada $[x_{i-1}, x_i]$ e zero nos pontos extremos, portanto deve ser identicamente zero. □

Teorema 2.1.4 Seja $h = \max_{1 \leq i \leq n} (x_i - x_{i-1})$. Então $\|u - u_I\|_E \leq Ch \|u''\|$ para todo $u \in V$, onde C é independente de h e u .

Prova: Relembrando a definição das duas normas e fazendo a soma sobre j , tem-se:

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} (u - u_I)'(x)^2 dx \leq c(x_j - x_{j-1})^2 \int_{x_{j-1}}^{x_j} u''(x)^2 dx$$

em função de $C = \sqrt{c}$. Seja $e = u - u_i$ definido como o erro, onde u_i é um polinômio linear

no intervalo $[x_{j-1}, x_j]$. Aplicando na equação anterior,

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} e'(x)^2 dx \leq c(x_j - x_{j-1})^2 \int_{x_{j-1}}^{x_j} e''(x)^2 dx$$

Fazendo uma mudança de variáveis com uma relação afim entre os intervalos $[x_{j-1}, x_j]$ e $[0, 1]$, onde $x = x_{j-1} + \tilde{x}(x_j - x_{j-1})$ e $\tilde{e}(\tilde{x}) = e(x_{j-1} + \tilde{x}(x_j - x_{j-1}))$, tem-se:

$$\int_0^1 \tilde{e}'(\tilde{x})^2 d\tilde{x} \leq c \int_0^1 \tilde{e}''(\tilde{x})^2 d\tilde{x}.$$

Verificação: $\tilde{e}$ tende a zero em ambos os extremos do intervalo, pois o erro de interpolação é zero em todos os nós. Pelo teorema de Rolle, $\tilde{e}(\xi) = 0$, para qualquer ξ que satisfaça $0 < \xi < 1$. Ainda,

$$\tilde{e}(y) = \int_{\xi}^y \tilde{e}''(\tilde{x}) d\tilde{x}.$$

Pela desigualdade de Schwarz,

$$\begin{aligned} |\tilde{e}'(y)| &= \left| \int_{\xi}^y \tilde{e}''(\tilde{x}) d\tilde{x} \right| \\ &= \left| \int_{\xi}^y 1 \cdot \tilde{e}''(\tilde{x}) d\tilde{x} \right| \\ &\leq \left| \int_{\xi}^y 1 d\tilde{x} \right|^{1/2} \cdot \left| \int_{\xi}^y \tilde{e}''(\tilde{x})^2 d\tilde{x} \right|^{1/2} \\ &= |y - \xi|^{1/2} \left(\int_{\xi}^y \tilde{e}''(\tilde{x})^2 d\tilde{x} \right)^{1/2} \\ &\leq |y - \xi|^{1/2} \left(\int_0^1 \tilde{e}''(\tilde{x})^2 d\tilde{x} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

integrando com respeito a y e tomando

$$c = \sup_{0 < \xi < 1} \int_0^1 |y - \xi| dy = \frac{1}{2}$$

temos a verificação completa. ■

Observe-se que $\|u - u_s\| + Ch \|u - u_s\|_E \leq 2(Ch)^2 \|u''\|$. Ainda, o interpolante define um operador linear $I : C^0([0, 1]) \rightarrow S$, onde $Iv = v_I$. O lema 2.1.2 diz que I é uma *projeção*, $I^2 = I$. A estimativa para $\tilde{e}'$ é um exemplo da desigualdade de Sobolev, nas quais os valores da função nos pontos podem ser estimados em termos das quantidades integradas

envolvendo suas derivadas.

2.1.6 Relação com o Método das Diferenças

A matriz de rigidez $\mathbf{K}$, como definida em (2.8), pode ser interpretada sob a ótica dos métodos de diferenças, como um operador diferença através das bases $\{\phi_i\}$. Seja $h_i = x_i - x_{i-1}$. Então a matriz inicial $K_{ij} = a(\phi_i, \phi_j)$ pode ser calculada como sendo:

$$\begin{aligned} K_{ii} &= h_i^{-1} + h_{i+1}^{-1}, \\ K_{i,i+1} &= K_{i+1,i} = -h_{i+1}^{-1} \quad (i = 1, 2, \dots, n-1) \end{aligned} \quad (2.9)$$

e $K_{nn} = h_n^{-1}$ com o resto entre a matriz K_{ij} e $\mathbf{K}$ igual a zero. Da mesma forma, a matriz inicial de $\mathbf{F}$ pode ser aproximada se f for suficientemente "suave"

$$(f, \phi_i) = \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})(f(x_i) + \mathcal{O}(h))$$

onde $h = \max h_i$. Do teorema de Taylor, a integral de ϕ_i é $(h_i + h_{i+1})/2$. O erro será $\mathcal{O}(h^2)$ quando $1 - (h_i/h_{i+1}) = \mathcal{O}(h)$, então a i -ésima equação de $\mathbf{KU} = \mathbf{F}$ (para $1 \leq i \leq n-1$) pode ser escrita como

$$\frac{-2}{h_i + h_{i+1}} \left[\frac{U_{i+1} - U_i}{h_{i+1}} - \frac{U_i - U_{i-1}}{h_i} \right] = \frac{2(f, \phi_i)}{h_i + h_{i+1}} = f(x_i) + \mathcal{O}(h) \quad (2.10)$$

daí, o operador diferença (lado esquerdo da equação) $\mathcal{O}(h)$ ser a precisão de aproximação do operador diferencial $-d^2/dx^2$ e não $\mathcal{O}(h^2)$, desde que $1 - (h_i/h_{i+1}) = \mathcal{O}(h)$. Para uma malha uniforme, as equações reduzem-se à conhecida equação de diferenças

$$-\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} = f(x_i) + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.11)$$

conhecida como precisão de segunda ordem.

Pode-se notar a força que tem o formalismo de elementos finitos, para geração de esquemas discretos de aproximação de solução de equações diferenciais, baseado na formulação de problemas de valores de contorno, manipulando diferentes condições com facilidade, simplesmente trocando espaços de dimensões infinitas por subespaços finitos. Comparado com métodos de diferenças finitas, pode-se notar que são as mesmas equações de diferenças finitas e usualmente apresentam mais similaridades que distinções, no entanto o método dos elementos finitos apresenta propriedades de convergência muito mais rápidas; a notação da formulação do método dos elementos finitos é mais compacta, ou seja, apresenta



uma maior facilidade na codificação de algoritmos computacionais para as várias linguagens de programação. Esta última característica tem tornado o método dos elementos finitos muito utilizado para as mais variadas aplicações que necessitem de soluções (quase sempre aproximadas com ótima precisão) para equações diferenciais.

2.2 Os Elementos Finitos.

2.2.1 A construção de um espaço de Elementos Finitos.

Para uma solução aproximada de um problema variacional $a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V$ é necessário construir subespaços dimensionais finitos $S \subset V$. Um elemento finito é definido, conforme Brenner [9]:

Seja i) $K \subseteq R^n$ é um domínio com pedaço de fronteira "suave" (elemento),
 ii) P é um espaço dimensional finito de funções em K (as funções de forma), e

iii) $N = \{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ é a base para P' (variáveis nodais).

Então (K, P, N) é chamado um **elemento finito**.

Assume-se implicitamente que as variáveis nodais, N_i , formam um espaço dual de funções de mesmo tamanho, isto é, um Espaço de Sobolev.

Seja (K, P, N) um elemento finito, e seja $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_k\}$ a base de P dual para $N(N_i(\phi_j) = \delta_{ij})$. Isto é chamada base nodal para P .

Lema 2.2.1 Seja P um espaço vetorial d -dimensional e seja $\{N_1, N_2, \dots, N_d\}$ um subconjunto de um espaço dual P' . Então as seguintes afirmações são equivalentes: i) $\{N_1, N_2, \dots, N_d\}$ é uma base de P' .

ii) Dado $v \in P$ com $N_i v = 0$ para $i = 1, 2, \dots, d$, então $v \equiv 0$.

Prova: Seja $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_d\}$ uma base de P . $\{N_1, N_2, \dots, N_d\}$ é uma base de P' se para todo L em P' $L = \alpha_1 N_1 + \alpha_2 N_2 + \dots + \alpha_d N_d$, pois $d = \dim P = \dim P'$. Esta equação é equivalente a $y_i = L(\phi_i) = \alpha_1 N_1(\phi_i) + \alpha_2 N_2(\phi_i) + \dots + \alpha_d N_d(\phi_i)$, $i = 1, 2, \dots, d$.

Seja $\mathbf{B} = (N_j(\phi_i))$, $i, j = 1, 2, \dots, d$. Então i) é equivalente a $B\alpha = y$ e é sempre solucionável, da mesma forma se B estiver invertido. Dado algum $v \in P$, pode-se escrever $v = \beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2 + \dots + \beta_d\phi_d$. Se $N_i v = 0$ significa que $\beta_1 N_i(\phi_1) + \beta_2 N_i(\phi_2) + \dots + \beta_d N_i(\phi_d) = 0$. No entanto, ii) é equivalente a $\beta_1 N_i(\phi_1) + \beta_2 N_i(\phi_2) + \dots + \beta_d N_i(\phi_d) = 0$ para $i = 1, 2, \dots, d \Rightarrow \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_d = 0$.

Seja $\mathbf{C} = (N_i(\phi_j))$, $i, j = 1, 2, \dots, d$. Então ii) é equivalente a $Cx = 0$ e tem somente soluções triviais, mesmo para C invertido. Mas $\mathbf{C} = \mathbf{B}^T$. Logo i) é equivalente a ii). final da prova.

Em geral tem-se $K = [a, b]$ e $P_k =$ conjunto de todos os polinômios de grau menor ou igual a k . Se $N_k = \{N_0, N_1, \dots, N_k\}$, onde $N_i v = v(a + (b - a)i / k) \forall v \in P_k$ e $i = 0, 1, \dots, k$, então (K, P_k, N_k) é um elemento finito. Aplicando-se (2.2.1), por exemplo, $v \in P_1$ e significa que $v = a + bx$; $N_1(v) = N_2(v) = 0$ significa $a = 0$ e $a + b = 0$. Ainda, $a = b = 0$, isto é, $v \equiv 0$. Genericamente, se $v \in P_k$ e $0 = N_i(v) = v(a + (b - a)i / k) \forall i = 0, 1, \dots, k$ então v é identidade de acordo com o teorema fundamental da álgebra. Então, mais uma vez, (K, P_k, N_k) é um elemento finito. ■

2.2.2 O cálculo dos elementos finitos.

Um dos fatores do sucesso do Método dos Elementos Finitos foi a implementação computacional desenvolvida pela prática da engenharia. Um importante passo nesse processo é a *montagem* do produto interno $a(u, v)$ pela soma das contribuições de cada subintervalo, ou *elemento*, que são computados separadamente. Isto é facilitado através do uso de um esquema numérico chamado *indexação local-global*. Este índice, $i(e, j)$, relaciona o número de um nó local, j , em um particular elemento, e , para sua posição na estrutura global de dados. No caso de um exemplo em uma dimensão sujeito a uma função de comportamento linear em cada "pedaço", os índices seriam particularmente simples: os elementos são baseados nos intervalos $I_e = [x_{e-1}, x_e]$ onde e é um inteiro variando de $1, \dots, n$ e $i(e, j) := e + j - 1$ para $e = 1, \dots, n$ e $j = 0, 1$. Para cada elemento (pedaço) tem-se dois parâmetros nodais: um corresponde à extremidade esquerda do intervalo ($j = 0$) nó 0, e o outro à extremidade direita do intervalo ($j = 1$) nó 1. Estes parâmetros são relacionados através de $i(e, j)$.

Pode-se escrever a interpolação da função contínua para o conjunto de todos os pedaços de função linear (sem imposição de condições de contorno) como

$$f_I = \sum_e \sum_{j=1}^1 f(x_{i(e,j)}) \phi_j^e \quad (2.12)$$

onde $\{\phi_j^e : j = 0, 1\}$ denota o conjunto de funções bases para as funções lineares no intervalo $I_e = [x_{e-1}, x_e]$:

$$\phi_j^e(x) = \phi_j((x - x_{e-1})/(x_e - x_{e-1}))$$

onde

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 1-x, & x \in [0, 1] \\ 0 & x \notin [0, 1] \end{cases} \quad \text{e} \quad \phi_1(x) = \begin{cases} x, & x \in [0, 1] \\ 0 & x \notin [0, 1] \end{cases}$$

note-se que todo conjunto de bases das funções "locais" está relacionado com as bases das funções no *elemento referência* $[0, 1]$ através da relação afim $[0, 1]$ para $[x_{e-1}, x_e]$ e, por definição, as bases locais da função (ϕ_j^e) são estendidas por zero fora do intervalo I_e .

A expressão (2.12), para o interpolante (conforme lema 2.1.2) mostra que qualquer função linear f , discretizada por pedaços, pode ser escrita na forma:

$$f := \sum_e \sum_{j=0}^1 f_{i(e,j)} \phi_j^e \quad (2.13)$$

onde $f_i = f(x_i)$ para todo i . Note-se que a cardinalidade da imagem do conjunto indexado $i(e, j)$ é a dimensão do espaço da função linear discretizada.

A forma definida em (2.2) pode ser calculada usando-se a representação (2.13) acima, por exemplo:

$$a(v, \omega) = \sum_e a_e(v, \omega)$$

onde a forma bilinear local é definida e calculada por

$$\begin{aligned} a_e(v, \omega) &: = \int_{I_e} v' \omega' dx \\ &= (x_e - x_{e-1})^{-1} \int_0^1 \left(\sum_j v_{i(e,j)} \phi_j \right)' \left(\sum_j \omega_{i(e,j)} \phi_j \right)' dx \\ &= (x_e - x_{e-1})^{-1} \begin{pmatrix} v_{i(e,0)} \\ v_{i(e,1)} \end{pmatrix}^t \mathbf{K} \begin{pmatrix} \omega_{i(e,0)} \\ \omega_{i(e,1)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e a matriz de *rigidez local*, $\mathbf{K}$, é dada por

$$\mathbf{K}_{i,j} = \int_0^1 \phi'_{i-1} \phi'_{j-1} dx \quad \text{para } i, j = 1, 2.$$

onde o espaço da função linear aos pedaços v está relacionado com o vetor espaço dos

valores v_i dos nós. O subespaço S da função linear aos pedaços que tendem a $x = 0$ pode ser identificado como o subespaço $\{(v_i) : v_0 = 0\}$. Incluindo-se v_0 na estrutura de dados (valores de zeros) pode-se montar a forma bilinear com as condições de contorno.

Considere um problema específico governado pela equação de Helmholtz, escrita para um domínio Ω com fronteiras Γ_f e Γ_n (fig. 2.2.2).

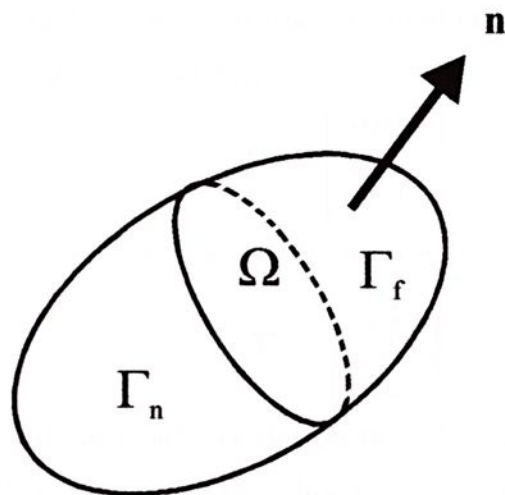


Figura 2.2.2: Região tridimensional Ω e as fronteiras Γ_f e Γ_n .

Considere ainda, que o vetor fluxo de energia, S , de Poynting, obtido das equações de Maxwell, dependentes do tempo, para um meio isotrópico, com permissividade, permeabilidade e índice de refração constantes, seja dado pela equação [25]

$$S = \frac{1}{2} E \times H^* \quad (2.14)$$

Sendo ϕ a componente do campo (elétrico ou magnético), e o número k^2 a constante associada à frequência, pode-se escrever

$$\nabla^2 \phi + k^2 \phi = 0 \text{ em } \Omega \quad (2.15)$$

o operador Laplaciano é dado em coordenadas cartesianas por

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

e em coordenadas cilíndricas por

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Assumindo que a fronteira Γ da região Ω consiste de parte de Γ_f na qual o valor de ϕ é dado como $\widehat{\phi}$ e parte de Γ_n na qual o valor de $\partial\phi/\partial n \equiv \psi$ é dado como $\widehat{\psi}$, a saber,

$$\phi = \widehat{\phi} \quad \text{em } \Gamma_f \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial n} = n \cdot \nabla\phi = \widehat{\psi} \quad \text{em } \Gamma_n \quad (2.17)$$

onde n é o vetor normal unitário externo. O gradiente é descrito pelo operador matriz diferencial em coordenadas cartesianas

$$\nabla = \begin{bmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{bmatrix}$$

Este operador tem, em coordenadas cilíndricas, a matriz

$$\nabla = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Considerando as condições de contorno de Dirichlet, 2.16, de Neumann, 2.17, e a equação de fluxo dada pela eq. 2.14, o funcional para a equação 2.15 é dado por

$$F = \frac{1}{2} \int \int \int_{\Omega} [(\nabla\phi)^2 - k^2\phi^2] d\Omega - \int \int_{\Gamma_n} \phi \widehat{\psi} d\Gamma \quad (2.18)$$

O primeiro termo do lado direito da equação 2.18 denota a integral sobre a região Ω e o segundo termo denota o trabalho que o campo ϕ realiza ao longo de Γ_n . Para o regime estacionário, a diferencial da equação de Euler é $\delta F = 0$, o que coincide com a equação 2.15. A condição de contorno dada pela 2.16 é chamada de condição natural pois é automaticamente satisfeita pelo procedimento variacional; a condição de contorno 2.17 é chamada de condição forçada pois é experimental.

Dividindo a região Ω em um número de elementos e e considerando o funcional F_e para cada elemento

$$F_e = \frac{1}{2} \int \int \int_e [(\nabla\phi)^2 - k^2\phi^2] d\Omega - \int \int_{\Gamma_e} \phi\psi d\Gamma \quad (2.19)$$

o funcional para a região toda é dado por

$$F = \sum_e F_e$$

O primeiro termo do lado direito da equação 2.19 denota a integral sobre cada elemento e , o segundo termo o trabalho que o campo ϕ realiza ao longo do contorno Γ_e , e

o somatório $\sum_e$ estende-se sobre todos os elementos.

Para n nós ϕ pode ser aproximado, em cada elemento, como

$$\phi = \sum_{i=1}^n N_i \phi_i \quad (2.20)$$

onde ϕ_i é o i -ésimo parâmetro nodal do elemento e e N_i é o interpolador ou função de forma.

A função de forma N_i , quando o valor do funcional contém derivadas de primeira ordem, deve satisfazer as condições de complemento e compatibilidade:

- (1) A variável ϕ e suas derivadas devem incluir os termos constantes.
- (2) A variável ϕ deve ser contínua na interface entre dois elementos adjacentes.

A condição de complemento é satisfeita desde que se utilize expressões polinomiais completas em cada elemento, ou seja, elementos lineares ou de 1ª ordem devem utilizar polinômios de 1ª ordem, elementos de ordem superior devem usar polinômios de ordem superior. Ainda, o número de nós, n , em cada elemento coincide com o número de termos da expansão polinomial completa, e são dispostos de forma a satisfazer a condição de compatibilidade.

Na forma matricial, a equação 2.20 pode ser escrita como

$$\phi = \{N\}^T \{\phi\}_e \quad (2.21)$$

onde $\{\phi\}_e$ representa o vetor ϕ_i , $\{N\}$ representa o vetor N_i , T representa a transposta, $\{\cdot\}$ representa vetor coluna e $\{\cdot\}^T$ representa o vetor linha.

Substituindo a eq. 2.20 na eq. 2.19, obtém-se

$$F_e = \frac{1}{2} \int \int \int_e \left[\left(\nabla \sum_i N_i \phi_i \right)^2 - k^2 \left(\sum_i N_i \phi_i \right)^2 \right] d\Omega - \int \int_{\Gamma_e} \sum_i N_i \phi_i \psi d\Gamma$$

chamando

$$\begin{aligned} K_{i j} &= \int \int \int_e (\nabla N_i) \cdot (\nabla N_j) d\Omega \\ M_{i j} &= \int \int \int_e N_i N_j d\Omega \\ \psi_i &= \int \int N_i \psi d\Gamma \end{aligned}$$

resulta

$$F_e = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j [\phi_i (K_{ij} - k^2 M_{ij}) \phi_j] - \sum_i \phi_i \psi_i \quad (2.22)$$

denotando por $[K]_e$ a matriz K_{ij} e por $[M]_e$ a matriz M_{ij} e substituindo os outros termos da eq. 2.22 pelas suas respectivas representações matriciais, a expressão para F_e fica

$$F_e = \frac{1}{2} \{\phi\}_e^T [K]_e \{\phi\}_e - \frac{1}{2} k^2 \{\phi\}_e^T [M]_e \{\phi\}_e - \{\phi\}_e^T \{\psi\}_e \quad (2.23)$$

Na interface entre dois elementos adjacentes as condições de contorno são as mesmas e então $\phi_1 = \phi_2$ e $\psi_1 = -\psi_2$, e o funcional sobre toda a região será

$$F = \sum_e F_e = \frac{1}{2} \{\phi\}^T [K] \{\phi\} - \frac{1}{2} k^2 \{\phi\}^T [M] \{\phi\} - \{\phi\}^T \{\psi\} \quad (2.24)$$

onde os componentes do vetor $\{\phi\}$ são os valores de ϕ em todos os nós, as matrizes $[K]$ e $[M]$ são matrizes globais resultantes da contribuição de todos os elementos das matrizes $[K]_e$ e $[M]_e$ respectivamente, e os componentes do vetor $\{\psi\}$ são os valores desconhecidos de ψ nos contornos Γ_n e Γ_f . Fazendo $[A] = [K] - k^2[M]$, a equação 2.24 reduz-se a

$$F = \sum_e F_e = \frac{1}{2} \{\phi\}^T [A] \{\phi\} - \{\phi\}^T \{\psi\} \quad (2.25)$$

A primeira variação δF será

$$\delta F = \frac{1}{2} \delta \{\phi\}^T [A] \{\phi\} + \frac{1}{2} \{\phi\}^T [A] \delta \{\phi\} - \delta \{\phi\}^T \{\psi\} \quad (2.26)$$

onde $\delta \{\phi\}$ é a menor variação admissível de $\{\phi\}$. Como a matriz $[A]$ é simétrica, pode-se afirmar que $\delta \{\phi\}^T [A] \{\phi\} = \{\phi\}^T [A] \delta \{\phi\}$ e a eq. 2.26 pode ser simplificada para

$$\delta F = \delta \{\phi\}^T [A] \{\phi\} - \delta \{\phi\}^T \{\psi\}$$

Aplicando o princípio variacional $\delta F = 0$, tem-se que ou $\delta \{\phi\}^T = 0$, que não pode ocorrer pois $\delta \{\phi\} \neq 0$; ou $[A] \{\phi\} - \{\psi\} = 0$. Para problemas sem vibrações e sem o termo de excitação $\{\psi\} = 0$ e $[A] \{\phi\} = 0$. Então obtém-se

$$[K] \{\phi\} - k^2 [M] \{\phi\} = \{0\} \quad (2.27)$$

onde $\{0\}$ é o vetor nulo. Este tipo de problema é conhecido por problema de autovalor de onde se obtém autovalores para o sistema, também chamados de autofrequências.

A equação $[A] \{\phi\} = \{\psi\}$ foi obtida a partir da aplicação do princípio variacional ao funcional 2.19. O método de Galerkin produziria a mesma equação ($[A] \{\phi\} = \{\psi\}$) para

o princípio variacional, já que não é uma aplicação em um sistema dissipativo.

2.2.3 Elementos e coordenadas

Vários elementos podem ser utilizados no Método dos Elementos Finitos. Cada problema exigirá um tipo de elemento para melhor estudo do fenômeno modelado. Os mais comuns são: elemento linear, elemento de superfície (triangular, retangular, trapezoidal, anéis planos, etc) e o elemento de volume (cubos, tetraedros, anéis triangulares, etc).

Para o cálculo dos elementos das matrizes é necessário, em primeiro lugar, definir a função de forma N_i em termos de coordenadas locais para expressar as derivadas globais (do tipo que ocorre em K_{ij}) em termos de derivadas locais; em segundo lugar, o elemento de volume sobre o qual a integração tem sido realizada seja expresso em coordenadas locais com uma mudança apropriada dos limites de integração.

Considere um conjunto de coordenadas locais ξ, η, ζ e o correspondente conjunto de coordenadas globais x, y, z

$$\begin{aligned}x &= x(\xi, \eta, \zeta) \\y &= y(\xi, \eta, \zeta) \\z &= z(\xi, \eta, \zeta)\end{aligned}\tag{2.28}$$

Pela regra usual de diferenciação parcial, pode-se transformar a relação em uma de diferenciação

$$\begin{bmatrix} \partial/\partial\xi \\ \partial/\partial\eta \\ \partial/\partial\zeta \end{bmatrix} = [J] \begin{bmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{bmatrix}$$

onde a matriz $[J]$ é a matriz jacobiana dada por

$$[J] = \begin{bmatrix} \partial x/\partial\xi & \partial y/\partial\xi & \partial z/\partial\xi \\ \partial x/\partial\eta & \partial y/\partial\eta & \partial z/\partial\eta \\ \partial x/\partial\zeta & \partial y/\partial\zeta & \partial z/\partial\zeta \end{bmatrix}$$

Para encontrar as derivadas globais basta transpor a matriz jacobiana

$$\begin{bmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{bmatrix} = [J]^{-1} \begin{bmatrix} \partial/\partial\xi \\ \partial/\partial\eta \\ \partial/\partial\zeta \end{bmatrix}$$

onde $[J]^{-1}$ é a matriz jacobiana inversa. Então a relação de transformação para a integração

fica

$$\int \int \int f(x, y, z) dx dy dz = \int \int \int f(\xi, \eta, \zeta) |J(\xi, \eta, \zeta)| d\xi d\eta d\zeta$$

onde $|J|$ é o determinante da matriz jacobiana conhecido como jacobiano. Esta é a formulação mais completa, pois abrange os casos em 3D. Para os casos em uma dimensão, apenas a transformação ξ é utilizada e o formalismo torna-se bastante simples.

No presente trabalho, a proposta é mostrar, com a utilização do software Mathematica, algumas aproximações (linear, quadrática e cúbica) para o problema do poço de potencial em uma dimensão.

Elementos e aproximações.

De forma clássica [36] o cálculo deve ser feito em termos de variáveis normalizadas independentes do elemento. Para isso introduz-se uma coordenada local ξ em um elemento típico. Se

$$L_k = x_{(k)r} - x_{(k)l}$$

representa o comprimento do k - ésimo elemento, a coordenada normalizada ξ deve ser definida por

$$\xi = \frac{x - x_l}{L_k}$$

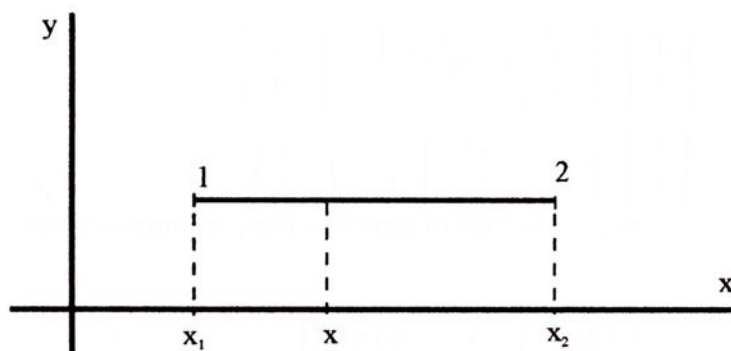


Figura 2.2.3: Elemento linear

De outra forma, chamando de l_e ao comprimento do elemento e x_k à coordenada da aresta k ($k = 1, 2$) da linha, pode-se escrever $l_e = x_2 - x_1$ (figura 2.2.3). Definindo L_1 e

L_2 em coordenadas locais ξ como

$$\begin{aligned} L_1 &= \xi \\ L_2 &= 1 - L_1 = 1 - \xi \end{aligned} \quad (2.29)$$

a diferenciação fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} &= l_e \frac{d}{dx} \\ \frac{d}{dx} &= -\frac{1}{l_e} \frac{d}{d\xi} \end{aligned} \quad (2.30)$$

A relação entre as coordenadas de linha e as coordenadas cartesianas é dada por

$$L_1 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad \text{e} \quad L_2 = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} \quad \text{ou} \quad (x_2 - x_1) = \frac{x - x_1}{L_1} = \frac{x_2 - x}{L_2}$$

então

$$\begin{aligned} L_1(x_2 - x) &= L_2(x - x_1) \\ L_1x_2 - L_1x &= L_2x - L_2x_1 \\ L_1x_2 + L_2x_1 &= L_1x + L_2x \\ L_1x_2 + L_2x_1 &= x(L_1 + L_2) \end{aligned}$$

como $L_1 + L_2 = 1$, pode-se escrever, na forma matricial, que

$$\begin{bmatrix} 1 \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \end{bmatrix}$$

Esta relação pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{x_2}{x_2 - x_1} & \frac{-1}{x_2 - x_1} \\ \frac{-x_1}{x_2 - x_1} & \frac{1}{x_2 - x_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \end{bmatrix} &= \frac{1}{l_e} \begin{bmatrix} x_2 & -1 \\ -x_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.31)$$

A relação de transformação para integração será dada por

$$\int_e f(x) dx = l_e \int_0^1 f(\xi) d\xi \quad (2.32)$$

As equações 2.29 e 2.30 fornecem para diferenciação

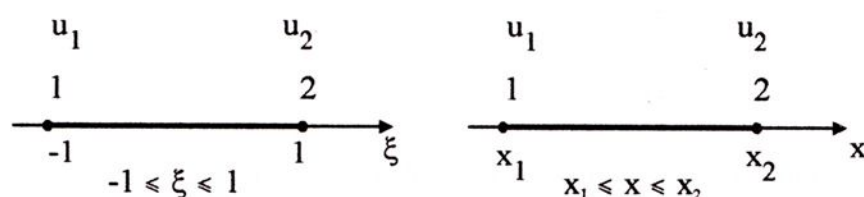
$$\begin{aligned} \frac{df}{dx} &= -\frac{1}{l_e} \left(\frac{\partial f}{\partial L_1} \frac{\partial L_1}{\partial \xi} + \frac{\partial f}{\partial L_2} \frac{\partial L_2}{\partial \xi} \right) \\ \frac{df}{dx} &= \frac{1}{l_e} \left(-\frac{\partial f}{\partial L_1} + \frac{\partial f}{\partial L_2} \right) \end{aligned}$$

e para integração

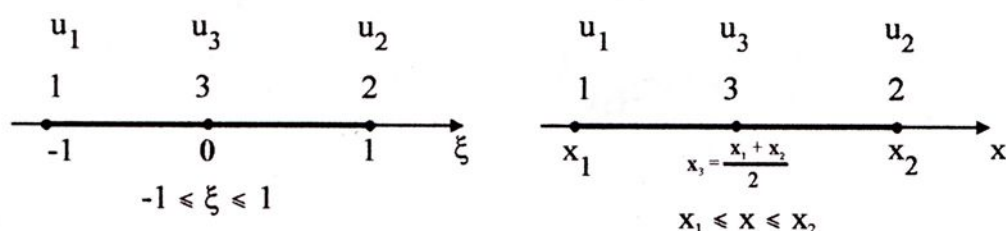
$$\begin{aligned}\int_e L_1^k L_2^l dx &= l_e \int_0^1 \xi^k (1-\xi)^l d\xi \\ &= l_e \frac{k!l!}{(k+l+1)!}\end{aligned}$$

Considerando-se os três tipos clássicos de aproximação, tem-se:

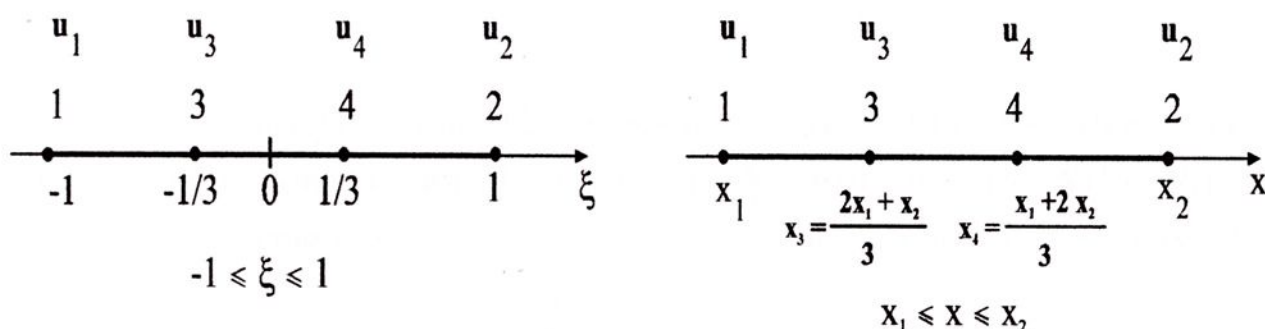
Aproximação linear



Aproximação quadrática



Aproximação cúbica



As aproximações podem ser resumidas, matricialmente, através do tipo de elemento escolhido, do número de nós discretizados e dos vetores $\{N\}$ e $\{N_x\}$ conforme a tabela (2.2.2):

Elemento	Nºde nós	(L_1, L_2)	$\{N\}$			$\{N_x\} = \frac{d\{N\}}{dx}$		
Linear	1	(1, 0)		L_1		$\frac{1}{l_e}$	-1	
	2	(0, 1)		L_2			1	
Quadrática	1	(1, 0)		$L_1(2L_1 - 1)$		$\frac{1}{l_e}$	$1 - 4L_1$	
	2	(0, 1)		$L_2(2L_2 - 1)$			$4L_2 - 1$	
	3	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$		$4L_1L_2$			$4(L_1 - L_2)$	
Cúbica	1	(1, 0)	16	$-(1 - \xi)(1 - 9\xi^2)$		16	$1 + 18\xi - 27\xi^2$	
	2	(0, 1)		$-(1 + \xi)(1 - 9\xi^2)$			$-1 + 18\xi + 27\xi^2$	
	3	$(\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$		$9(1 - \xi^2)(1 - 3\xi)$			$-27 - 18\xi + 81\xi^2$	
	4	$(\frac{2}{3}, \frac{1}{3})$		$9(1 - \xi^2)(1 + 3\xi)$			$27 - 18\xi - 81\xi^2$	

Tabela 2.2.2: Parâmetros para aproximações

Essas relações podem ser encontradas da seguinte forma: da relação 2.31 tira-se que

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{1}{l_e}(x_2 - x) \\ L_1 &= \frac{1}{(x_2 - x_1)}(x_2 - x) = \frac{(x_2 - x)}{(x_2 - x_1)} \\ \partial x L_1 &= -\frac{1}{x_2 - x_1} = -\frac{1}{l_e} \\ L_2 &= \frac{1}{l_e}(x - x_1) \\ L_2 &= \frac{1}{(x_2 - x_1)}(x - x_1) = \frac{(x - x_1)}{(x_2 - x_1)} \\ \partial x L_2 &= -\frac{1}{x_2 - x_1} = \frac{1}{l_e} \end{aligned}$$

e considerando-se que $L_1 = \xi$ e que $L_2 = 1 - \xi$, e as definições de $\{N\}$ e $\{N_x\}$ chega-se aos valores da tabela, além das transpostas de $\{N\}$ e de $\{N_x\}$, respectivamente $\{N\}^T$ e $\{N_x\}^T$.

As integrais necessárias à construção dos elementos das matrizes são dadas por

$$\begin{aligned} &\int_e \{N\} \{N\}^T dx \\ &\int_e \{N_x\} \{N_x\}^T dx \\ &\int_e \{N_x\} \{N\}^T dx \end{aligned}$$

que calculadas produzem:

(1) Aproximação linear

$$\begin{aligned}
\int_e \{N\} \{N\}^T dx &= \frac{l_e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N_x\}^T dx &= \frac{1}{l_e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N\}^T dx &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.33}$$

(2) Aproximação quadrática

$$\begin{aligned}
\int_e \{N\} \{N\}^T dx &= \frac{l_e}{30} \begin{bmatrix} 4 & -1 & 2 \\ -1 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 16 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N_x\}^T dx &= \frac{1}{3 l_e} \begin{bmatrix} 7 & 1 & -8 \\ 1 & 7 & -8 \\ -8 & -8 & 16 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N\}^T dx &= \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -3 & 1 & -4 \\ -1 & 3 & 4 \\ 4 & -4 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

(3) Aproximação cúbica

$$\begin{aligned}
\int_e \{N\} \{N\}^T dx &= \frac{105 l_e}{16} \begin{bmatrix} 65536 & 9728 & 50688 & -18432 \\ 9728 & 65536 & -18432 & 50688 \\ 50688 & -18432 & 331776 & -41472 \\ -18432 & 50688 & -41472 & 331776 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N_x\}^T dx &= \frac{5}{16 l_e} \begin{bmatrix} 37888 & -3328 & -48384 & 13824 \\ -3328 & 37888 & 13824 & -48384 \\ -48384 & 13824 & 110592 & -76032 \\ 13824 & -48384 & -76032 & 110592 \end{bmatrix} \\
\int_e \{N_x\} \{N\}^T dx &= \frac{5}{16} \begin{bmatrix} -10240 & -1792 & -14952 & 6144 \\ 1792 & 10240 & -6144 & 14952 \\ 14952 & 6144 & 0 & -20736 \\ -6144 & -14952 & 20736 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.35}$$

O Método dos Elementos Finitos compreende ainda muitos outros tipos de discretizações, tais como: elementos triangulares (aproximação linear, quadrática, cúbica, etc), elementos tetraédricos (aproximação linear, quadrática e cúbica), elementos anéis (aproximação linear, quadrática, cúbica, etc), elementos anéis triangulares (aproximação linear, quadrática, cúbica, etc), e alguns elementos especiais - elementos isoparamétricos ou infinitos. A cada aplicação do método pode-se escolher o elemento que melhor se ajuste às

condições do problema.

2.3 Uma aplicação da equação de Schrödinger por elementos finitos.

Como aplicação da equação de Schrödinger, considere o problema do poço de potencial em um sistema composto por Gálio - Arsênio e Alumínio - Gálio - Arsênio (GaAs/AlGaAs), cuja massa efetiva é dada por

$$m_{eff} = (0,067 + 0,083x) m_0$$

onde m_0 é a massa do elétron livre e que vale

$$m_0 = 9,110 \times 10^{-31} kg$$

No sistema GaAs/AlGaAs as condições de contorno são bem conhecidas de forma a garantir a continuidade, ao longo de toda região de heterointerface, da função de contorno e de suas derivadas divididas pela massa efetiva. Se fosse um outro sistema “não bem comportado”, por exemplo Índio, Arsênio e Gálio, Antimônio (InAs/GaSb), as condições de contorno não seriam apropriadas. Mas, nesses casos, pode-se encontrar uma relação linear entre a função de contorno e suas derivadas, na região de heterointerface, e através de uma *matriz de transferência* (ver [30]) reduzir o problema ao caso “bem comportado”.

Dividindo-se a região em um número finito de k elementos tem-se o funcional como $F = \sum_{e=1}^k F_e$. Em cada elemento, o funcional para a equação 1.12 será dado por

$$F_e = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \frac{d\phi^*}{dx} \frac{d\phi}{dx} + U \phi^* \phi - E \phi^* \phi \right) dx + \frac{\hbar^2}{2m_{eff1}} \phi_1^* \psi_1 - \frac{\hbar^2}{2m_{eff2}} \phi_2^* \psi_2 \quad (2.36)$$

onde os subscritos 1 designa o valor para $x = x_1$ e 2 designa o valor para $x = x_2$, ϕ^* designa a função de contorno ϕ dividida pela massa efetiva e $\psi \equiv d\phi/dx$.

Tomando-se n nós em cada elemento, ϕ pode ser aproximado, em cada elemento, por

$$\phi = \sum_{i=1}^n N_i \phi_i \quad (2.37)$$

onde ϕ_i é o i -ésimo parâmetro nodal do elemento



N_i é a interpolação ou função de forma.

Substituindo 2.37 em 2.36, tem-se

$$\begin{aligned}
 F_e &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{d}{dx} \left[\sum_{i=1}^n N_i \phi_i^* \right] \frac{d}{dx} \left[\sum_{j=1}^n N_j \phi_j \right] + U(x) \sum_{i=1}^n N_i \phi_i^* - \sum_{i=1}^n N_j \phi_j \right. \\
 &\quad \left. - E \sum_{i=1}^n N_i \phi_i^* \sum_{i=1}^n N_j \phi_j \right) \\
 F_e &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \sum_i \sum_j \frac{dN_i}{dx} \phi_i^* \frac{dN_j}{dx} \phi_j \right) dx + \int_{x_1}^{x_2} \sum_i \sum_j N_i \phi_i^* N_j \phi_j U(x) dx - \\
 &\quad - E \int_{x_1}^{x_2} \sum_i \sum_j N_i \phi_i^* N_j \phi_j dx \\
 F_e &= \sum_i \sum_j \left(\int_{x_1}^{x_2} \frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx} dx \right) \phi_i^* \phi_j + \sum_i \sum_j \left(\int_{x_1}^{x_2} N_i N_j U(x) dx \right) \phi_i^* \phi_j - \\
 &\quad - E \sum_i \sum_j \left(\int_{x_1}^{x_2} N_i N_j dx \right) \phi_i^* \phi_j
 \end{aligned}$$

Chamando

$$\begin{aligned}
 K_{i \ j} &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx} dx + \int_{x_1}^{x_2} N_i N_j U(x) dx \\
 M_{i \ j} &= \int_{x_1}^{x_2} N_i N_j dx
 \end{aligned}$$

então

$$F_e = \sum_i \sum_j K_{i \ j} \phi_i^* \phi_j - E \sum_i \sum_j M_{i \ j} \phi_i^* \phi_j \quad (2.38)$$

em notação matricial, $k_{i \ j} = [k]_e$ e $M_{i \ j} = [M]_e$ e o funcional pode ser representado por

$$F_e = \{\phi\}_e^T [k]_e \{\phi\}_e - E \{\phi\}_e^T [M]_e \{\phi\}_e$$

onde os componentes do vetor $\{\phi\}$ são os valores de ϕ em todos os nós.

Na fronteira entre dois elementos adjacentes (elemento anterior e elemento posterior), as condições de contorno são $\phi_1 = \phi_2$ e $\psi_1 = \psi_2$. O funcional para toda a região será dado por

$$\begin{aligned}
 F &= \sum_e F_e = \{\phi\}^T [k] \{\phi\} - E \{\phi\}^T [M] \{\phi\} + \frac{\hbar^2}{2 m_{eff1}} \phi_1^* \psi_1 - \frac{\hbar^2}{2 m_{eff2}} \phi_2^* \psi_2 \\
 F &= \{\phi\}^T [k] \{\phi\} - E \{\phi\}^T [M] \{\phi\} - \{\psi\} \{\phi\}^T \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

onde o vetor $\{\psi\}$ representa os valores do campo nos nós extremos (fronteira) e nos nós

internos (que são zero).

Se poço de potencial pode ser descrito como

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{se } x < -a \text{ ou } x > +a \\ 0 & \text{se } -a < x < +a \end{cases}$$

o problema se decompõe em tres regiões: à esquerda do poço ($x < -a$), dentro do poço ($-a < x < +a$) e à direita do poço ($x > +a$).

Considere-se um poço de potencial arbitrário $U(x)$ na região $x_1 < x < x_2$ e potenciais constantes U_1 e U_2 nas regiões $x \leq x_1$ e $x \geq x_2$, respectivamente. Dividindo-se a região $x_1 \leq x \leq x_2$ em um número finito de elementos de linha, pode-se expandir a função de contorno ϕ em cada elemento como

$$\phi = \{N\}^T \{\phi\}_e. \quad (2.40)$$

Substituindo 2.40 em 2.36, obtém-se a equação da matriz global pelo princípio variacional

$$[K] \{\phi\} - E [M] \{\phi\} = \{\psi\}$$

já explicitada em 2.27 e 2.38; onde

$$\begin{aligned} [K] &= \sum_e \int_e \left[\frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \{N_x\} \{N_x\}^T + U \{N\} \{N\}^T \right] dx \\ [M] &= \sum_e \int_e \{N\} \{N\}^T dx \\ [\psi] &= \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \psi_1 \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \psi_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

tendo o primeiro e o último componentes do vetor $\{\phi\}$ os valores de ϕ nos nós extremos $x = x_1$ e $x = x_2$ respectivamente. O campo ϕ na região uniforme $x \leq x_1$ ou $x \geq x_2$ é dado por

$$\phi \propto \begin{cases} \exp(\alpha_1 x) & \text{para } x \leq x_1 \\ \exp(-\alpha_2 x) & \text{para } x \geq x_2 \end{cases} \quad (2.41)$$

onde

$$\alpha = \sqrt{\frac{2 m_{eff} (U - E)}{\hbar^2}}$$

em que os subcritos 1 e 2 designam as soluções nas regiões $x \leq x_1$ e $x \geq x_2$.

Para 2.41 os valores de ψ em $x \leq x_1$ e $x \geq x_2$ são dados por

$$\psi_1 = \alpha_1 \phi_1$$

$$\psi_2 = \alpha_2 \phi_2$$

logo, a matriz $[K]$ recebe esta contribuição nos nós extremos do poço de potencial. Então,

$$[\tilde{K}] = [K] + \begin{bmatrix} \frac{\alpha_1 h^2}{2 m_{eff1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{\alpha_2 h^2}{2 m_{eff2}} \end{bmatrix}$$

e

$$[\tilde{K}] \{\phi\} - E[M] \{\phi\} = 0$$

cujas condições têm uma solução não trivial dada por

$$[\tilde{K}] - E[M] = 0$$

que é a própria equação para *autoestados* ($A + \lambda B = 0$) em uma estrutura de poço de potencial. Fixando as fronteiras artificiais próximas dos limites do poço de potencial e impondo a condição de $d\phi/dx = 0$ para $x \leq x_1$ e $x \geq x_2$, obtém-se

$$[K] \{\phi\} - E[M] \{\phi\} = 0$$

que é a equação de um típico problema de autovalores com autovalor E e autovetor $\{\phi\}$. Conforme [33] o problema resume-se na solução de um sistema na seguinte forma:

$$[K] \{x\} = \lambda [M] \{x\} \quad (2.42)$$

onde $[K]$ é a matriz de rigidez e $[M]$ é a matriz de massa. Inicialmente divide-se ambos os termos por λ e renomeia-se $1/\lambda = \lambda^*$.

$$\frac{1}{\lambda} [K] \{x\} = [M] \{x\} = \lambda^* [K] \{x\} \quad (2.43)$$

A matriz $[K]$ pode ser escrita como o produto da matriz triangular inferior e sua transposta

$$[K] = [L][L]^T$$

Definindo $\{y\} = [L]^T \{x\}$, ou seja, $\{x\} = [L^{-1}] \{y\}$, e substituindo em 2.43

$$[M][L^{-1}]^T \{y\} = \lambda^* [K][L^{-1}]^T \{y\}$$

que multiplicada por $[L^{-1}]$ fornece:

$$[L^{-1}][M][L^{-1}]^T\{y\} = \lambda^*\{y\}, \tag{2.44}$$

que é a forma geral esperada.

Capítulo 3

Implementação no ambiente *Mathematica* de uma rotina baseada no MEF capaz de resolver a equação de Schrödinger para alguns tipos de potenciais unidimensionais

O computador, atualmente, é uma ferramenta poderosa para elaboração de cálculos e aproximações numéricas. A limitação ao seu uso para operações algébricas está cada vez menor e a cada dia aumentam as implementações nessa área.

O software *Mathematica* é uma das ferramentas mais poderosas para aplicações em um grande número de cálculos iterativos, não necessitando de compilação dos programas tal como nas linguagens mais tradicionais como o Fortran e o C. Os cálculos são executados linha a linha e os resultados intermediários podem ser visualizados. Dessa forma, aproximações numéricas podem ser implementadas por quem não é versado em computação, basta apenas um conhecimento específico dos comandos do sistema.

O *Mathematica* é dotado de vários recursos para cálculos algébricos, numéricos e visualização gráfica. Pode-se considerá-lo como um ambiente de programação completo, onde tanto o estilo de programa funcional quanto o interpretativo podem ser usados para escrever longas funções e bibliotecas. Quando algumas aplicações requerem grande tempo de processamento, as partes críticas de um código podem ser escritas como uma rotina em FORTRAN ou C que trocam informações com o ambiente *Mathematica* através de rotinas

do *MathLink*.

O Mathematica produz gráficos em duas e três dimensões, bem como contornos e equipotenciais. Pode-se plotar tanto funções quanto listas de dados. Ele é dotado de muitas opções para controlar a saída de gráficos. Algumas versões do *Mathematica* também suportam animações gráficas [40].

Todos os gráficos produzidos no Mathematica estão no padrão PostScript, e podem ser transportados para uma ampla variedade de programas [39]. Por fim, o Mathematica pode ler dados em vários formatos, e pode gerar saídas para compiladores como C, FORTRAN e TEX. Maiores detalhes sobre os recursos de programação nesse ambiente podem ser encontrados em [7],[8],[19].

Neste trabalho, o software será aplicado para a solução de um problema de valores de contorno que nada mais é que uma equação diferencial cujas condições dos valores de solução da função estão separados no espaço. O problema a ser abordado é do tipo solução da equação diferencial parcial de Schrödinger para obtenção dos autovalores, pela aplicação do Método dos Elementos Finitos.

3.1 As partes do programa

Como visto anteriormente, é possível discretizar um domínio Ω em elementos finitos e escrever para um problema estacionário uma expressão matricial para o funcional que assume, em cada elemento, um valor parcial (contribuição). Para aplicar a condição de extremo ao funcional tem-se que somar todas as contribuições sobre o domínio Ω , ou seja,

$$F = \sum_{e=1}^k F_e$$

e, em seguida, aplicar a condição $\delta F = 0$, de onde obtém-se um sistema de equações lineares. Para fazer essa soma de contribuições deve-se mudar a numeração nos nós. A

numeração deixa de ser local e passa a ser global (domínio Ω). As matrizes dos sistemas de equações para problemas de autovalores contêm um número relativamente pequeno de elementos diferentes de zero. A i -ésima linha de uma matriz associada com as variáveis nodais de ordem I , contém, além do elemento diagonal, um elemento não nulo na coluna J (J diferente de I) apenas se as variáveis nodais I e J pertencerem a um mesmo elemento. Logo a matriz global passa a ser uma matriz de blocos, pois cada vetor que a compõe somente possui valores diferentes de zero no entorno da diagonal.

A junção dos elementos será efetuada segundo um esquema de elementos *desconectados*, quando se considera apenas os elementos finitos, e elementos *conectados* quando se considera todos os elementos finitos, conforme a figura ?? (ver [36])

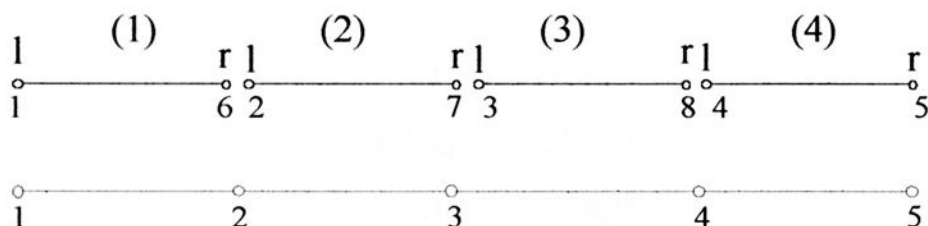


Figura 3.1.1: Numeração para elementos desconectados e conectados

então,

$$\begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \end{bmatrix}_{dis} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{bmatrix}_{con}$$

de outra forma,

$$\phi_{dis} = \mathbf{C}\phi_{con} \quad (3.1)$$

onde ϕ_{dis} é a matriz transformação de conexão e $\mathbf{C}\phi_{con}$ é chamada de matriz conexão.

Cabe notar que esta técnica tem alto custo computacional já que a matriz a ser trabalhada apresenta uma grande quantidade de zeros que poderiam ser excluídos de forma a minimizar espaço de memória. Então, da equação 2.24 tem-se

$$F = \frac{1}{2} \{\phi\}_{dis}^T [K]_{dis} \{\phi\}_{dis} - \frac{1}{2} k^2 \{\phi\}_{dis}^T [M]_{dis} \{\phi\}_{dis} - \{\phi\}_{dis}^T \{\psi\}_{dis} \quad (3.2)$$

mas como

$$\phi_{dis} = \mathbf{C} \phi_{con}$$

substituindo em 3.2, obtem-se

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \{\mathbf{C} \phi_{con}\}^T [K]_{dis} \{\mathbf{C} \phi_{con}\} - \frac{1}{2} k^2 \{\mathbf{C} \phi_{con}\}^T [M]_{dis} \{\mathbf{C} \phi_{con}\} - \{\mathbf{C} \phi_{con}\}^T \{\psi\}_{dis} \\ F &= \frac{1}{2} \phi_{con}^T \mathbf{C}^T K_{dis} \mathbf{C} \phi_{con} - \frac{1}{2} k^2 \phi_{con}^T \mathbf{C}^T M_{dis} \mathbf{C} \phi_{con} - \phi_{con}^T \mathbf{C}^T \psi_{dis} \end{aligned} \quad (3.3)$$

com uma transformação algébrica

$$\begin{aligned} A_d &= \mathbf{C} A_c \\ \mathbf{C}^T A_d &= \mathbf{C}^T \mathbf{C} A_c \\ A_c &= \mathbf{C}^T A_d (\mathbf{C}^T \mathbf{C})^{-1} \\ A_c &= \mathbf{C}^T A_d \mathbf{C} \end{aligned}$$

então pode-se chamar

$$\begin{aligned} K_{con} &= \mathbf{C}^T K_{dis} \mathbf{C} \\ M_{con} &= \mathbf{C}^T M_{dis} \mathbf{C} \end{aligned}$$

que aplicado na equação 3.3

$$F = \frac{1}{2} \phi_{con}^T K_{con} \phi_{con} - \frac{1}{2} k^2 \phi_{con}^T M_{con} \phi_{con} - \phi_{con}^T \mathbf{C}^T \psi_{dis} \quad (3.4)$$

De forma resumida (figura 3.1.2), o problema da construção do sistema de equações envolve os seguintes aspectos:

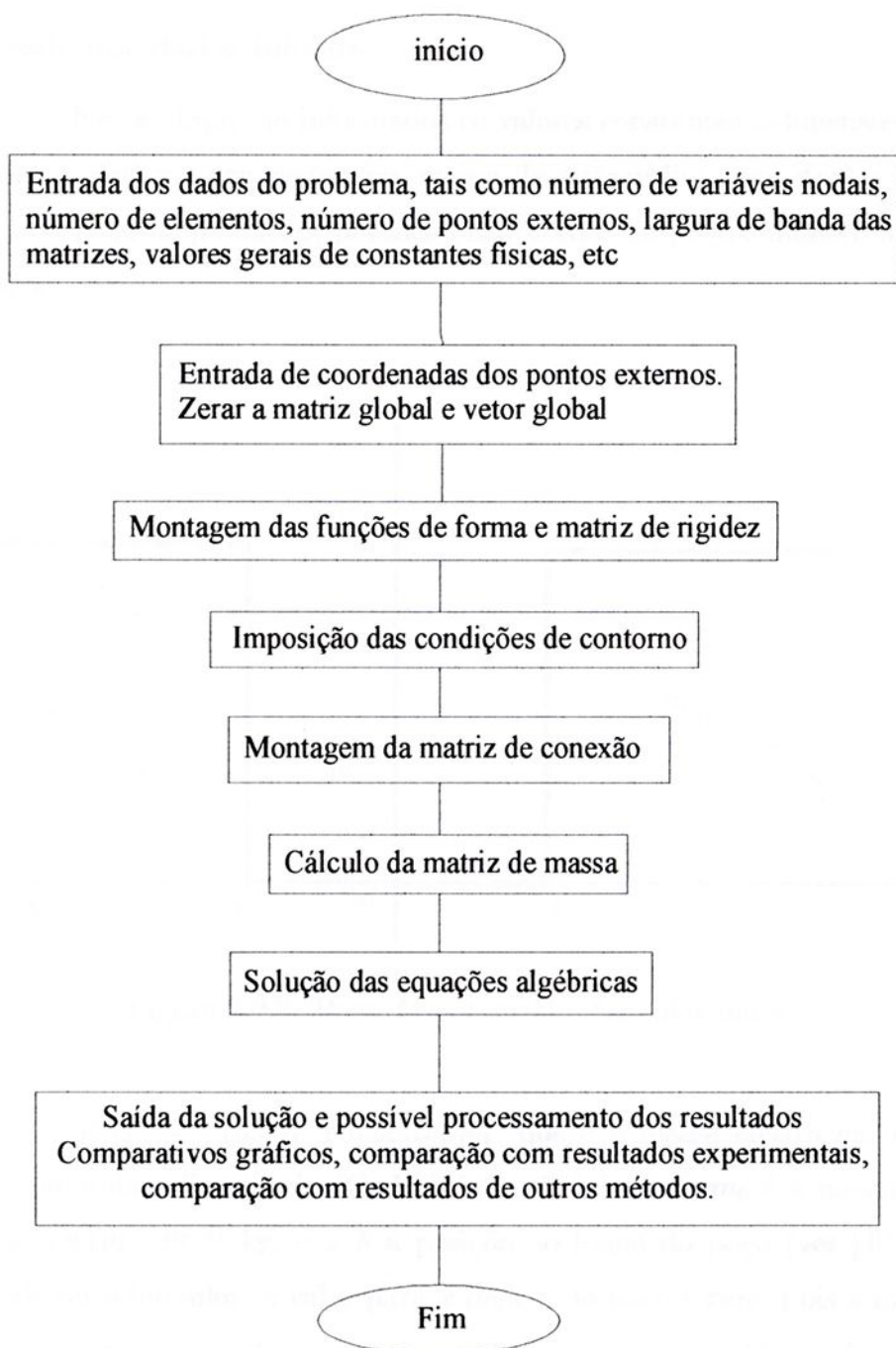


Figura 3.1.2: Diagrama de blocos - partes do programa

3.2 Caso 1 - O poço de potencial.

Entrada dos dados iniciais

Nesta etapa são informados os valores constantes e dimensões físicas do problema: massa efetiva e seu acréscimo, massa do elétron livre, constantes de Plank e da luz, largura do poço de potencial, potencial nas bordas do poço e número de elementos para a simulação.

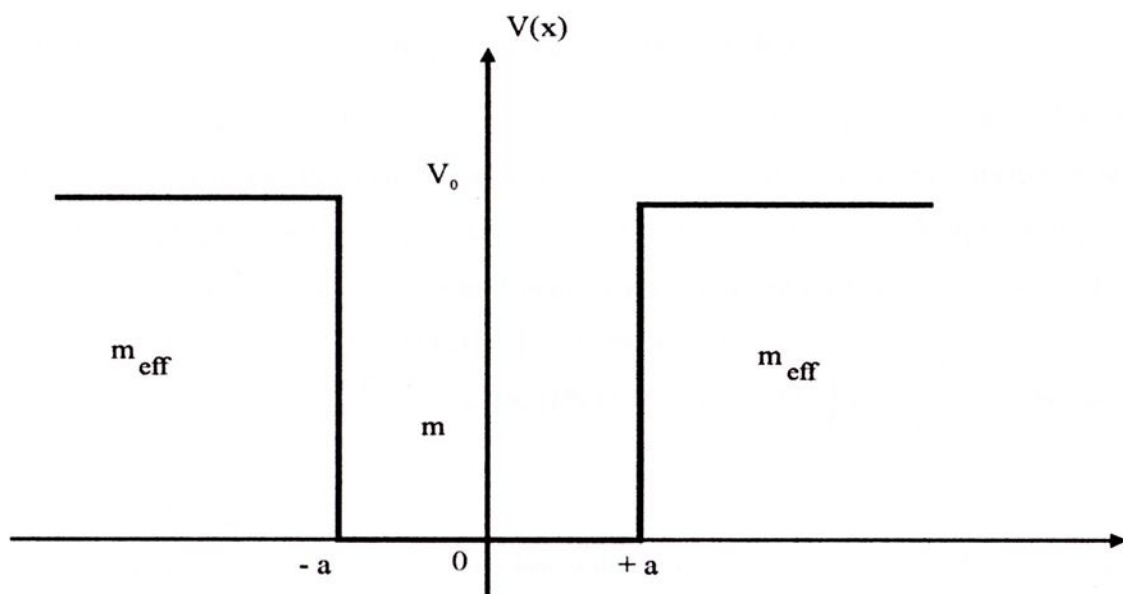


Figura 3.2.3: Poço de potencial retangular finito

$m_{eff} = (0.067 + 0.083x)m_0$ que é a massa efetiva em um sistema, gálio-arsênio/alunínio-gálio-arsênio ($\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), onde m_0 é a massa do elétron livre e vale $m_0 = 9.110 \cdot 10^{-31}$ kg, e x é a posição ao longo do poço (ver [4]), no caso de poço quadrado ou retangular, o valor para x dentro do poço é zero, pois a massa efetiva é nula dentro do poço, e $x = 0,3$ constante antes e após o poço, já que é uma propriedade do semiconductor e não tem variação na seção.

$c = 2.998 \cdot 10^8$ m/s que é a velocidade da luz no vácuo em metros por segundo,

$m_0 = \frac{0.511 \cdot 10^6}{c^2}$ eV, massa do elétron livre em elétron Volt,

$h = 4.136 \cdot 10^{-15}$ eVs, constante de Plank em elétron Volt segundo,

$\hbar = \hbar_{\text{bar}} = \frac{h}{2\pi}$, constante reduzida de Plank,

$\text{larg} = 100 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, largura do poço em metros ($100 \text{ \AA}$)

$U_0 = 0.225 \text{ eV}$, potencial na borda do poço em elétron Volt.

$\text{nelem} = 101$, número de elementos discretizados.

Visualização do poço

$\text{poço} = \text{Compile}[\{x, \text{larg}/2\}, \text{If}[\text{Abs}[x] < \text{larg}/2, 0.0, U_0]]$

$\text{Plot}[\text{poço}[x, \text{larg}/2], \{x, -2 \text{larg}/2, 2 \text{larg}/2\}]$

Funções de forma e cálculo da matriz de rigidez

Entrada das funções de forma (matrizes) $\{N\}$, $\{N_x\}$, e cálculo de $\{N^T\}$, $\{N_x^T\}$, e de suas integrações. Para cada aproximação os valores das funções de forma serão tomados em 2.33, aproximação linear; 2.34, aproximação quadrática; e 2.35, aproximação cúbica.

Nocaso de aproximação linear, a matriz de rigidez será montada por:

$$\begin{aligned} & (*) \quad \sum \int_e (\{N_x\} \{N_x\}^T + U \{N\} \{N\}^T) dx \quad *) \\ & (*) \quad \int_0^1 \left(\frac{1}{\pi m_{eff}} l_e \{N_x\} \{N_x\}^T + U l_e \{N\} \{N\}^T \right) d\xi \quad *) \quad \text{em coordenadas} \end{aligned}$$

locais.

$$l_e = \frac{\text{larg}}{\text{nelem}}$$

$$(*) \quad \text{nas bordas do poço} \quad *)$$

$$U = U_0$$

$$k_b = \int_0^1 \left(\frac{1}{\pi m_{eff}} l_e \{N_x\} \{N_x\}^T + U l_e \{N\} \{N\}^T \right) d\xi$$

$$(*) \quad \text{no interior do poço} \quad *)$$

$$U = 0$$

$$k_t = \int_0^1 \left(\frac{1}{\pi m_{eff}} l_e \{N_x\} \{N_x\}^T + U l_e \{N\} \{N\}^T \right) d\xi$$

$$K = \text{Table}[0, \{i, 2 \text{nelem}\}, \{j, 2 \text{nelem}\}]$$

$$\text{list}k_t = \text{Table}[k_t[[1, 1]], \{i, 2 \text{nelem} - 4\}]$$

$$\text{Do}[K[[i, j]] = k_b[[i, j], \{i, 1, 2\}]]$$

$$\text{Do}[K[[2(\text{nelem} - 1) + i, 2 \text{nelem} - 2 + j]] = k_b[[1, j], \{i, 1, 2\}, \{j, 1, 2\}]]$$

$$\text{Do}[K[[i, i]] = k_t[[1, 1]], \{i, 3, 2 \text{nelem} - 2\}]$$

$$\text{Do}[K[[2i, 2i - 1]] = k_t[[2, 1], \{i, 2, \text{nelem} - 1\}]]$$

$$\text{Do}[K[[2i - 1, 2i]] = k_t[[1, 2], \{i, 2, \text{nelem} - 1\}]]$$

A matriz conexão será montada como

(* matriz conexão *)

mc = Table[0, {2 nelem}, {nelem + 1}]

mc = mc

Do[mc[i, i]] = 1, {i, 1, nelem + 1}]

Do[mc[i, i - nele.]] = 1, {i, nelem + 2, 2 nelem}}

K_{con} = Transpose[mc] · (K · mc)

Cálculo da matriz de massa

(* matriz de massa *)

mlocal = $\int_0^1 l_e \{N\} \{N\}^T d\xi$

listM = Table[mlocal[[1, 1]], {i, 2 nelem}]

M = DiagonalMatrix[listM]

Do[M[[2i, 2i - 1]] = mlocal[[1, 2], {i, 1, nelem}]

Do[M[[2i - 1, 2i]] = mlocal[[2, 1]], {i, 1, nelem}]

M_{con} = Transpose[mc] · (M · mc)

Cálculo da energia e dos autovalores

ε = K_{con} · Inverse[M_{con}]

autovalores = Eigenvalues[ε]

A partir desses resultados são separados aqueles que estão dentro dos limites do poço de potencial e verificados por modo gráfico conforme [19].

3.2.1 Resultados para uma partícula em um poço de potencial

Para validar a rotina implementada no software *Mathematica*, tomou-se por referência os resultados apresentados em: [7], problema 10.1.2 - *Sturm-Liouville Eigenvalue Problem: Schrödinger Equation of a Particle in a Box*, pg 607. Os resultados mostrados pelo autor [7], utilizando o problema de autovalor de Sturm-Liouville são:

para o seguinte problema:

largura do poço = $100 \text{ \AA}$

altura de barreira = $0,300 \text{ eV}$

Este mesmo problema foi simulado com a rotina implementada no *Mathematica*



n° pontos	Autoestados				
	1°	2°	3°	4°	5°
300	0.253323	0.165997	0.0943271	0.0421404	0.0105617
500	0.2510465	0.1639334	0.09288456	0.04140061	0.01036078

Tabela 3.2.1: Resultados Bhader [7]

que pode ser acompanhada no apêndice A. Nessa rotina considerou-se:

a) fator de escala $x_0 \Rightarrow 1\text{ eV} = \frac{\hbar^2}{(m_0\ x_0)} = \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2(m_0\ x_0)} \Rightarrow x_0 = 2.76042\ \text{\AA}$, para garantia da homogeneidade dimensional. Dessa forma, a equação de Schrödinger pode ser reescrita como

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi - \frac{2m_{eff}}{x_0^2}U(x)\Psi + \frac{2m_{eff}}{x_0^2}E\Psi = 0$$

b) Massa efetiva adimensional para o semicondutor GaAs = 0.067.

Foram simulados os autoestados para o número de elementos, *nelem*, variando de 101 a 1751 com subintervalos de 30 e 50 elementos, obtendo-se os seguintes valores, conforme as tabelas 3.2.2, 3.2.3, 3.2.4, 3.2.5 e 3.2.6:

101	131	151	201	231	251	301
0,231859	0,1398490	0,2294740	0,2282650	0,2682070	0,2275340	0,2270440
0,066340	0,0413009	0,1062650	0,1309480	0,1734790	0,1473040	0,1588610
0,005481	0,0041220	0,0319966	0,0613770	0,0997951	0,0848913	0,1030730
		0,0035180	0,0192975	0,0470976	0,0402414	0,0596624
			0,0025389	0,0151505	0,0131292	0,0285818
				0,0021577	0,0019553	0,0096273

Tabela 3.2.2: Autovalores de 101 elementos a 301 elementos

331	351	401	431	451	501	531
0,2547080	0,2950770	0,2858080	0,2475860	0,2786890	0,2730500	0,2890010
0,1880700	0,2266940	0,2264300	0,1961900	0,2262250	0,2260600	0,2431860
0,1316880	0,1674360	0,1740440	0,1508460	0,1792890	0,1835500	0,2013580
0,0855532	0,1172980	0,1286470	0,1115490	0,1378780	0,1455190	0,1635180
0,0496480	0,0762689	0,0902317	0,0782949	0,1019890	0,1119620	0,1296640
0,0239271	0,0443341	0,0587925	0,0510773	0,0716185	0,0828795	0,0997925
0,0081982	0,0214488	0,0343143	0,0298817	0,0467594	0,0582664	0,0739026
	0,0074274	0,0167545	0,0146665	0,0273977	0,0381170	0,0519907
		0,0059437	0,0052712	0,0134926	0,0224176	0,0340509
				0,0048890	0,0111287	0,0200697
					0,0041084	0,0100085
						0,0037325

Tabela 3.2.3: Autovalores de 331 elementos a 531 elementos

551	601	631	651	701	731	751
0,2684730	0,2646850	0,2782840	0,2999340	0,29421400	0,27061900	0,28929900
0,2259250	0,2258130	0,2401980	0,2614990	0,25878000	0,23803600	0,25643500
0,1870810	0,1900540	0,2049360	0,2257180	0,22563600	0,20755800	0,22556500
0,1519390	0,1574060	0,1724970	0,1925900	0,19478000	0,17918400	0,19669000
0,1204980	0,1278700	0,1428820	0,1621150	0,16621200	0,15291300	0,16980700
0,0927562	0,1014440	0,1160880	0,1342920	0,13993000	0,12874500	0,14491800
0,0687113	0,0781254	0,0921145	0,1091190	0,11593600	0,10668000	0,12202000
0,0483602	0,0579138	0,0709607	0,0865964	0,09422630	0,08671630	0,10111500
0,0316973	0,0408058	0,0526246	0,0667222	0,07480190	0,06885330	0,08220030
0,0187090	0,0267958	0,0371032	0,0494949	0,05766110	0,05309010	0,06527590
0,0093573	0,0158704	0,0243910	0,0349116	0,04280240	0,03942520	0,05034090
	0,0079930	0,0144749	0,0229668	0,03022300	0,02785570	0,03739350
		0,0073191	0,0136475	0,01991740	0,01837630	0,02643110
			0,0069182	0,01187280	0,01097410	0,01744830
				0,00605523	0,00561619	0,01043230
						0,00535077

Tabela 3.2.4: Autovalores de 551 elementos a 751 elementos

801	831	851	901	931	951	1001
0,28502900	0,29496100	0,28128700	0,27798000	0,28695800	0,27503700	0,29762600
0,25439000	0,26486600	0,25259100	0,25099700	0,26038900	0,24957500	0,27240000
0,22550300	0,23640000	0,22544800	0,22540000	0,23511800	0,22535600	0,24829700
0,19836900	0,20956300	0,19985800	0,20118800	0,21114500	0,20238100	0,22531700
0,17298800	0,18435400	0,17582100	0,17836000	0,18846900	0,18064900	0,20345900
0,14935800	0,16077200	0,15333600	0,15691800	0,16709000	0,16016000	0,18272300
0,12748000	0,13881900	0,13240200	0,13686000	0,14700700	0,14091400	0,16310900
0,10735300	0,11849200	0,11302000	0,11818600	0,12822100	0,12291000	0,14461600
0,08897580	0,09979180	0,09518840	0,10089500	0,11073200	0,10614900	0,12724500
0,07234880	0,08271790	0,07890760	0,08498820	0,09453770	0,09062880	0,11099600
0,05747110	0,06726970	0,06417700	0,07046430	0,07963940	0,07635060	0,09586680
0,04434160	0,05344660	0,05099570	0,05732300	0,06603640	0,06331370	0,08185890
0,03295890	0,04124750	0,03936300	0,04556360	0,05372820	0,05151760	0,06897150
0,02332020	0,03067100	0,02927720	0,03518530	0,04271410	0,04096170	0,05720430
0,01542010	0,02171430	0,02073570	0,02618660	0,03299340	0,03164520	0,04655690
0,00924633	0,01437220	0,01373320	0,01856480	0,02456450	0,02356660	0,03702870
0,00476756	0,00863235	0,00825753	0,01231450	0,01742470	0,01672310	0,02861880
			0,00742402	0,01156880	0,01110960	0,02132590
				0,00698509	0,00671449	0,01514710
						0,01007730
						0,00610521

Tabela 3.2.5: Autovalores de 801 elementos a 1001 elementos

1031	1051	1101	1251	1501	1701	1751
0,2805850	0,2939250	0,2905790	0,28223000	0,28888700	0,29586300	0,30853300
0,2568070	0,2700250	0,2678750	0,26249000	0,27218300	0,28091500	0,29369300
0,2340870	0,2471440	0,2460980	0,24347000	0,25597900	0,26635500	0,27922000
0,2124250	0,2252810	0,2252490	0,22516800	0,24027400	0,25218500	0,26511400
0,1918210	0,2044370	0,2053280	0,20758500	0,22506800	0,23840300	0,25137500
0,1722750	0,1846100	0,1863350	0,19072000	0,21036200	0,22501000	0,23800300
0,1537860	0,1658010	0,1682690	0,17457300	0,19615400	0,21200500	0,22499700
0,1363550	0,1480090	0,1511300	0,15914500	0,18244600	0,19939000	0,21235900
0,1199800	0,1312350	0,1349180	0,14443500	0,16923600	0,18716300	0,20008700
0,1046630	0,1154780	0,1196330	0,13044300	0,15652600	0,17532400	0,18818200
0,0904016	0,1007380	0,1052750	0,11716900	0,14431400	0,16387400	0,17664300
0,0771971	0,0870147	0,0918438	0,10461300	0,13260100	0,15281200	0,16547100
0,0650488	0,0743080	0,0793387	0,09277440	0,12138700	0,14213900	0,15466600
0,0539563	0,0626176	0,0677599	0,08165360	0,11067100	0,13185500	0,14422800
0,0439193	0,0519432	0,0571071	0,07125030	0,10045500	0,12195800	0,13415600
0,0349372	0,0422844	0,0473800	0,06156430	0,09073630	0,112450000	,12445000
0,0270091	0,0336407	0,0385782	0,05259550	0,08151650	0,10333000	0,11511100
0,0201336	0,0260112	0,0307012	0,04434380	0,07279510	0,09459880	0,10613800
0,0143081	0,0193944	0,0237481	0,03680880	0,06457200	0,08625540	0,09753190
0,0095272	0,0137876	0,0177174	0,02999020	0,05684730	0,07830020	0,08929200
	0,0091858	0,0126066	0,02388740	0,04962070	0,07073310	0,08141840
		0,0084104	0,01849960	0,04289230	0,06355410	0,07391110
			0,01382530	0,03666180	0,05676300	0,06677000
			0,00986190	0,03092900	0,05036000	0,05999510
				0,02569380	0,04434480	0,05358640
				0,02095570	0,03871750	0,04754380
				0,01671430	0,03347780	0,04186720
				0,01296860	0,02862580	0,03655650
				0,00971723	0,02416110	0,03161170
					0,0200836	0,02703260
					0,01639290	0,02281910
					0,01308850	0,01897090
					0,01016940	0,01548760
					0,00763434	0,01236870
					0,00548092	0,00961336
					0,00370503	0,00722016
					0,00229934	0,00518679
					0,00125088	0,00350923
						0,00218042
						0,00118803

Tabela 3.2.6: Autovalores de 1031 elementos a 1751 elementos

501	751	1001	1251	1501	1751	Valor Esperado
0,26847300 0,22592500	0,25878000 0,22563600	0,24829700 0,22531700	0,24347000 0,22516800	0,24027400 0,22506800	0,238003000 0,224997000	0,25104652
0,18355000 0,14551900	0,16980700 0,14491800	0,16310900 0,14461600	0,15914500 0,14443500	0,15652600 0,14431400	0,154666000 0,144228000	0,16393341
0,11196200 0,08287950	0,10111500 0,08220030	0,11099600 0,09586680	0,10461300 0,09277440	0,10045500 0,09073630	0,106138000 0,097531900	0,09288457
0,05826640 0,03811700	0,05034090 0,03739350	0,04655690 0,03702870	0,04434380 0,03680880	0,04289230 0,03666180	0,041867200 0,036556500	0,04140061
0,02241760 0,01112870	0,01744830 0,01043230	0,01514710 0,01007730	0,01382530 0,00986190	0,01296860 0,00971723	0,012368700 0,009613360	0,01036079

Tabela 3.2.7: Autovalores para construção do gráfico de convergência

Foram escolhidos 5 pares de valores de cada simulação para indicar a convergência de aproximação para cada autoestado.

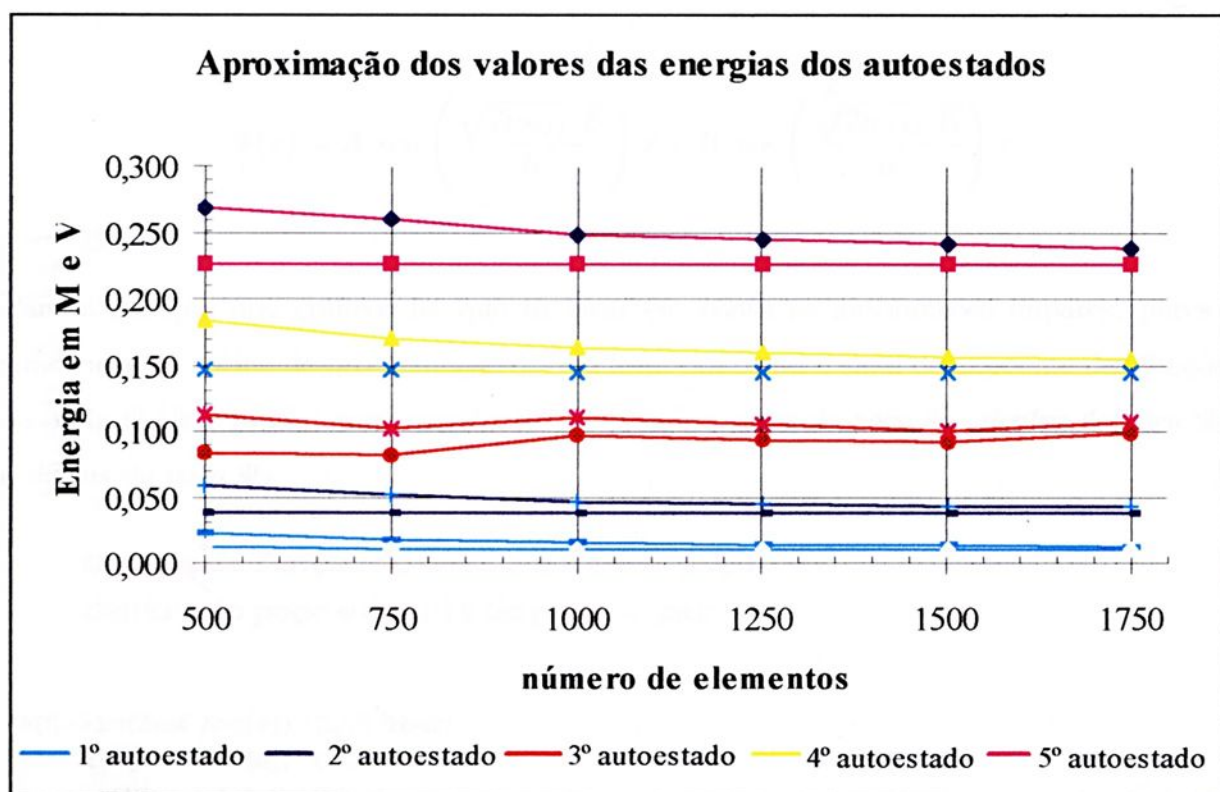


Figura 3.2.4: Convergência dos autovalores para o poço de potencial

3.2.2 Verificação gráfica

Uma outra forma para verificação dos resultados é através de solução gráfica, ou seja, gerar a função de onda antes do poço, dentro do poço e após o poço e juntá-las de forma a se perceber a continuidade. Devido ao tamanho das matrizes dos dados das autofunções não é possível produzir os gráficos a partir delas. Uma alternativa foi gerar os gráficos a partir da aplicação direta da função de onda com cada um dos autoestados, mas nesse caso tem que se considerar as constantes de integração A e B , conforme mostrado por Eisberg e Resnick (ver [15], pg 180 e 879). A e B são os ajustes para que a probabilidade total de se encontrar a partícula em algum lugar seja igual a 1. Mostra-se que (ver [15],

pg 270) a equação de Schrödinger independente do tempo na região $-L/2 < x < L/2$ ($L = l_{\text{arg}} = \text{largura do poço}$), onde $U(x) = 0$, tem como autofunção da onda estacionária para a partícula livre

$$\Psi(x) = A \operatorname{sen} \left(\frac{\sqrt{2m_{\text{eff}} E}}{\hbar} x \right) + B \cos \left(\frac{\sqrt{2m_{\text{eff}} E}}{\hbar} x \right)$$

Para a geração dos gráficos há que se levar em conta as autofunções ímpares, pares e simétricas. A rotina de programação deverá levar em conta o sinal do expoente das funções de onda Ψ (Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3) correspondentes às posições *antes do poço* Ψ_1 , *dentro do poço* Ψ_2 , e *depois do poço* Ψ_3 .

Curvas da função de onda Ψ antes do poço, dentro do poço e depois do poço - par

```

In[1]:= k1=(2*meff Abs[e])^(1/2)/hbar;
        k3=(2*meff Abs[e])^(1/2)/hbar;
        psi1[x_,e_]:=A Exp[k1 x];
        psi3[x_,e_]:=B Exp[-k3 x];

In[5]:= Clear[eqn,hbar,m0,mef]
        eqn[e_]:=D[psi2[x],{x,2}]+(2*m0/hbar^2) (e-U[x]) psi2[x]

Out[6]=  $\frac{2m_0 \psi_2[x] (e - U[x])}{\hbar^2} + \psi_2''[x]$ 

In[7]:= c=2.998 10^8; (* velocidade da luz *)
        m0=(0.5110) (1 10^6)/c^2; (* massa do elétron livre em eV *)
        meff=0.067 m0; (* massa efetiva para o sistema GaAs/AlGaAs *)
        hbar=6.582 10^(-16); (* hbar = h/(2 pi) *)

In[11]:= U[x_]:=U0;
        U0=-0.3; (* altura do poço de potencial em eV *)
        L= 10^-8; (* largura do poço em metros (Angstrom) *)
        A=1/Sqrt[L]; (* ajuste de normalização *)
        B=A; (* condição de simetria *)

In[16]:= V= Compile[{x, L/2}, If[Abs[x] < L/2, -0.3, 0.0]]

Out[16]= CompiledFunction[{x,  $\frac{L}{2}$ }, If[Abs[x] <  $\frac{L}{2}$ , -0.3, 0.], -CompiledCode-]

```



```

In[19]:= result=NDSolve[{(eqn[e]==0),
  psi2[-L/2]==psi1[-L/2,e],
  psi2'[-L/2]==D[psi1[x,e],x]/.x->-L/2},
  psi2[x],{x,-L/2,L/2}];
s[x_]=psi2[x]/.result;
plot2=Plot[s[x],{x,-L/2,L/2},PlotStyle->RGBColor[1,0,0]]

```

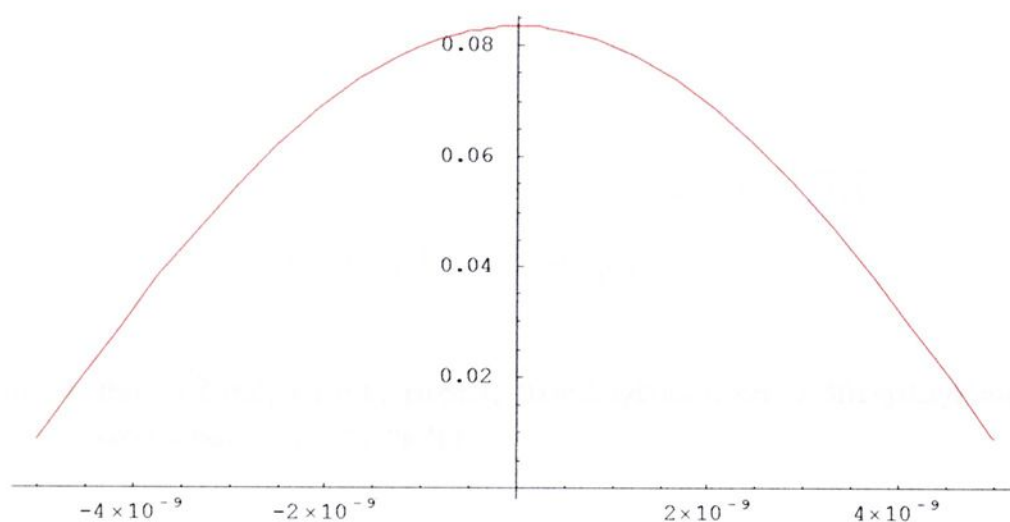
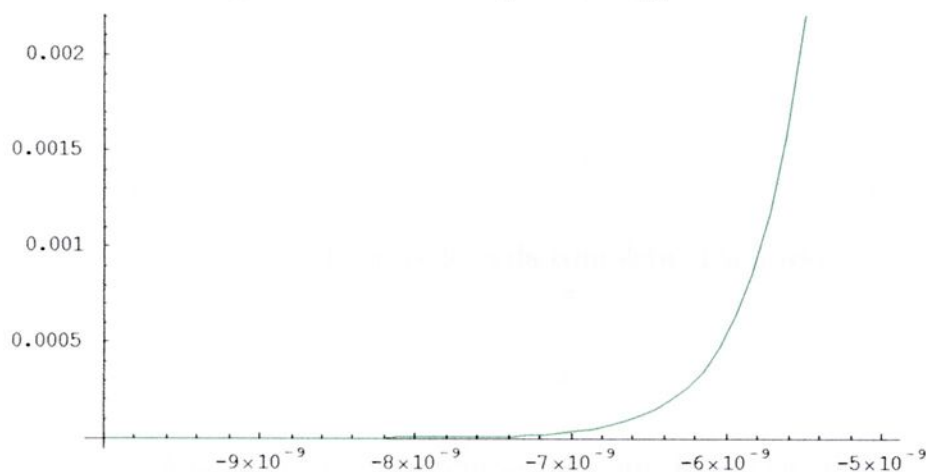


Figura 3.2.5: Função de onda dentro do poço

```

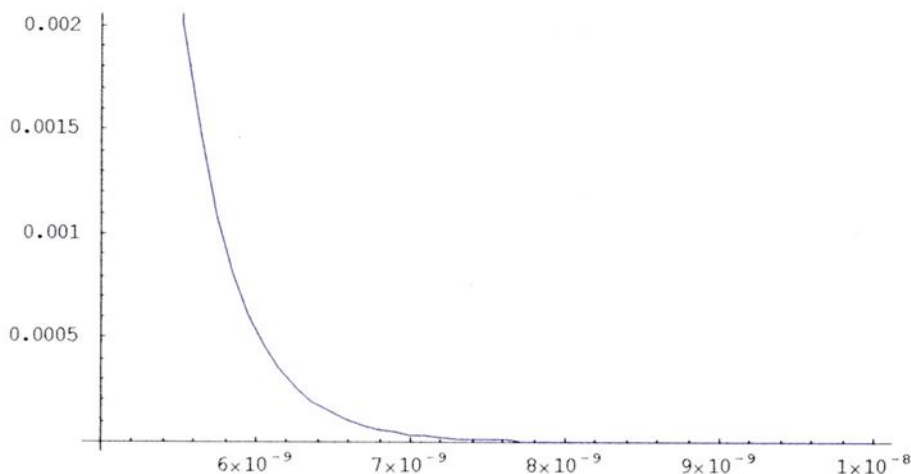
In[23]:= plot1 = Plot[psi1[x, e], {x, -L, -L/2},
  PlotStyle -> RGBColor[0, 1, 0]]

```



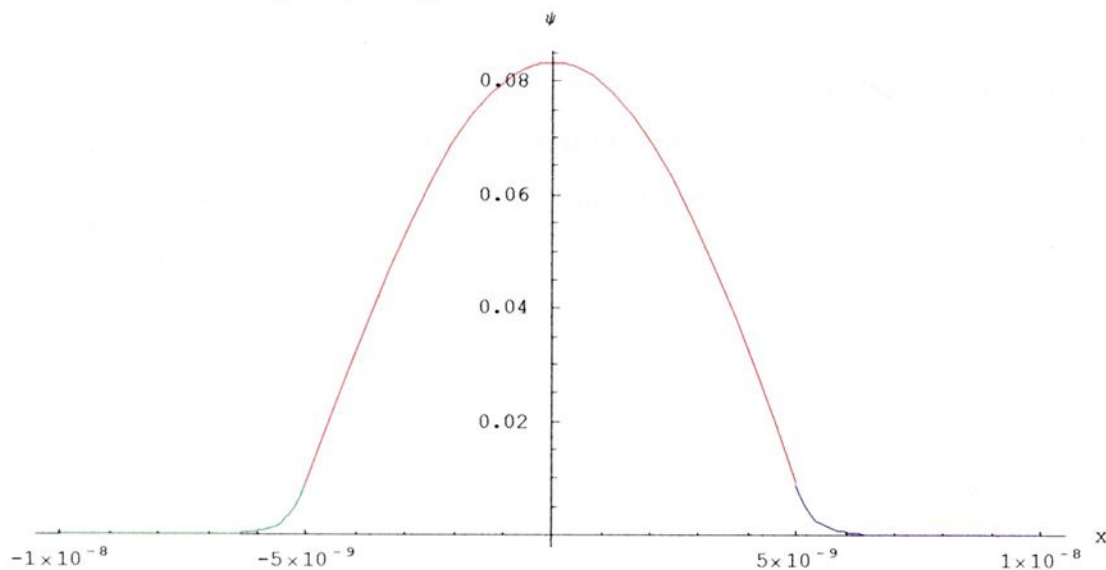
Função de onda antes do poço

```
In[24]:= plot3 = Plot[psi3[x, e], {x, L/2, L},
  PlotStyle -> RGBColor[0, 0, 1]]
```



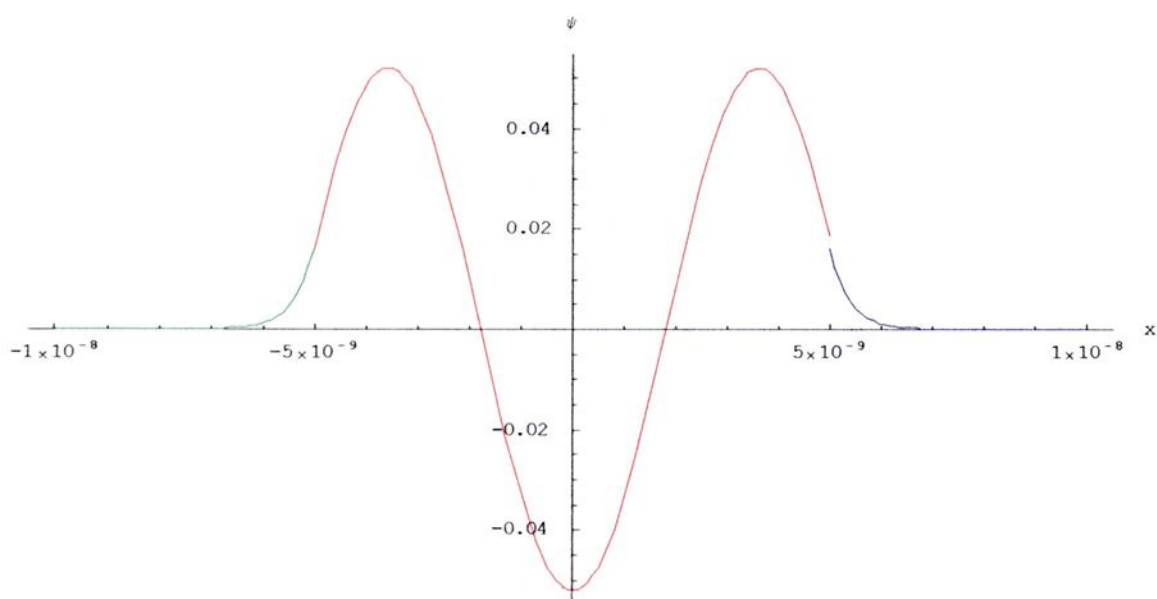
Função de onda depois do poço

```
In[25]:= Show[plot2, plot1, plot3, DisplayFunction -> $DisplayFunction,
  AxesLabel -> {"x", "\psi"}];
```



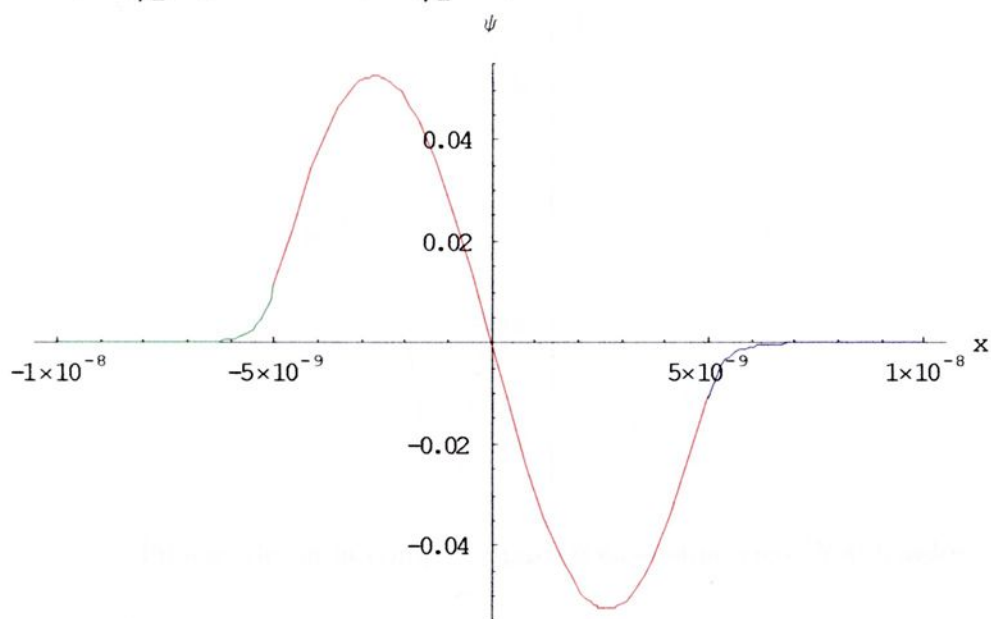
Função de onda completa (1º autovalor)

Ainda no caso par tem-se mais um autovalor, 0.0975319, cujo gráfico é com $A = 1.13 \frac{1}{\sqrt{L}}$:

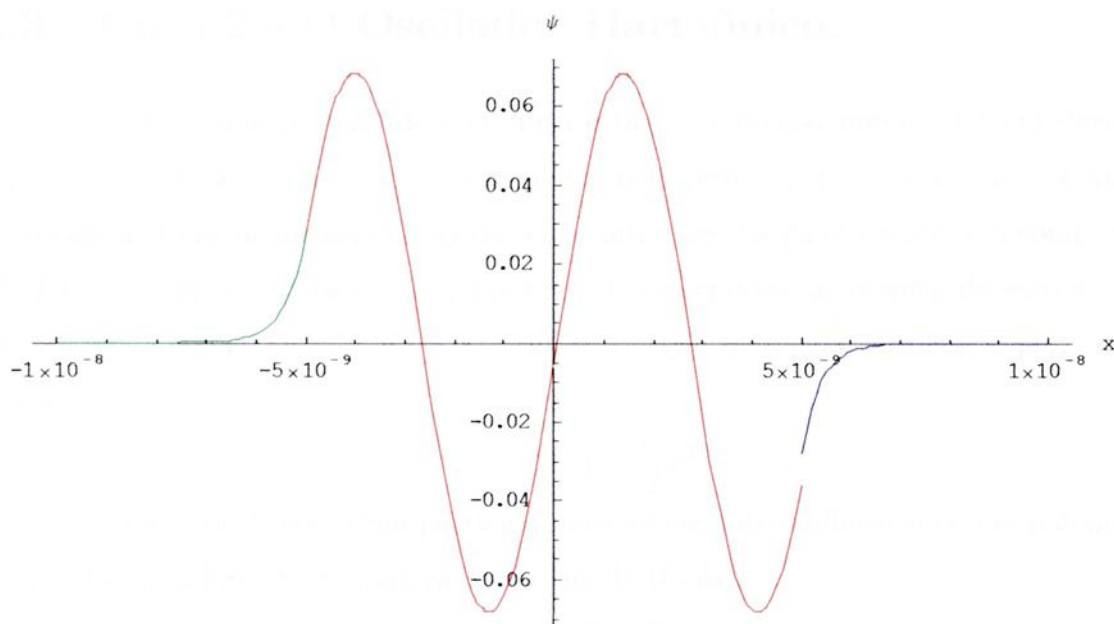


Função de onda completa para o caso par (3º autovalor)

Para o caso ímpar, basta alterar a condição das constantes A e B , $A = -B$, a simular para os autovalores 0.0365565 e 0.144228, obtendo-se os seguintes gráficos para $A = 1,23 \frac{1}{\sqrt{L}}$ e para $A = 1,26 \frac{1}{\sqrt{L}}$ respectivamente:

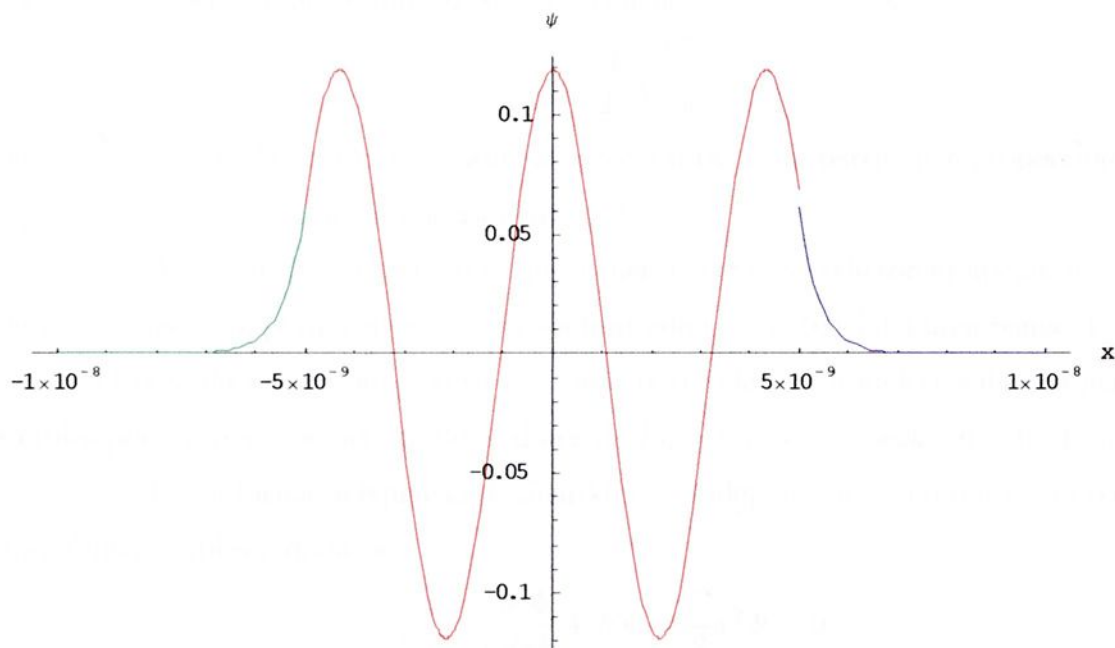


Função de onda completa para o caso ímpar (2º autovalor)



Função de onda completa para o caso ímpar (4ºautovalor)

Para o caso simétrico, 5ºautovalor, o gráfico será:



Função de onda completa para o caso simétrico (5ºautovalor)

3.3 Caso 2 - O Oscilador Harmônico.

Em uma posição de equilíbrio estável, a função potencial $U(x)$ deve ter um mínimo e pode ser aproximada, nesta região bem próxima do seu mínimo, por uma curva parabólica. Para pequenas vibrações, o que interessa, freqüentemente, é o comportamento de $U(x)$ nas proximidades de seu mínimo. Escolhendo-se as origens do eixo x e do eixo da energia como estando sobre o mínimo, a equação da função parabólica pode ser escrita como

$$U(x) = \frac{C}{2}x^2 \quad (3.5)$$

onde C é uma constante. Uma partícula movendo-se sob a influência de um potencial deste tipo sofre uma força restauradora linear (lei de Hooke)

$$F(x) = \frac{-dU(x)}{dx} = -Cx.$$

A mecânica clássica prevê que uma partícula sob a influência de uma força restauradora linear exercida pelo potencial dado por 3.5, deslocada de uma distância x_0 da sua posição de equilíbrio e aí liberada, vai oscilar em movimento harmônico simples em torno de sua posição de equilíbrio com freqüência

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{m}}$$

onde m é a massa da partícula. Assim, a energia total E da partícula é proporcional a x_0^2 , e pode ter qualquer valor, já que x_0 é arbitrário.

A mecânica quântica prevê que a energia total E pode tomar apenas um conjunto de valores discreto, porque a partícula está limitada pelo potencial a uma região de extensão finita. O postulado de Plank prevê que uma partícula executando oscilações harmônicas simples pode tomar apenas um dos valores de $E_n = n h \nu$ para $n = 0, 1, \dots$

Desta forma, a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador harmônico simples é dada por

$$\frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + E \Psi - \frac{C}{2} x^2 \Psi = 0. \quad (3.6)$$

A solução dessa equação fornece os autovalores e as autofunções para o oscilador harmônico simples. Para todos os valores de x , a autofunção Ψ_n é dada pelo produto de uma exponencial, cujo expoente é proporcional a $-x^2$, por um polinômio simples de ordem x^n .



O polinômio é responsável pelo comportamento oscilatório de Ψ_n na região classicamente permitida, na qual $E_n < U(x)$. O número de oscilações cresce quando n cresce, porque há n valores de x para os quais um polinômio de ordem x^n tem valor zero. Estes valores de x são as posições dos nós de Ψ_n . Para valores de n pequenos, as autofunções de um oscilador harmônico simples são muito próximas das do poço de potencial analisado anteriormente.

3.3.1 Resultados para o oscilador harmônico simples.

Tomando-se as condições de partícula livre e potencial descritos no problema do poço de potencial (seção 3.2), simulou-se a rotina executada pelo software *Mathematica*, para comparação dos resultados, já que os autoestados produzidos pelo oscilador harmônico simples devem coincidir com os encontrados no poço de potencial (referência [15] - páginas 284 a 288 e apêndice H, e [29]) para números quânticos n pequenos:

$$\text{comprimento} = 400 \text{ \AA} \qquad \text{constante} = 0,300 \text{ eV}$$

A rotina implementada no *Mathematica* que pode ser acompanhada no apêndice

B. Nessa rotina considerou-se:

$$\text{a) fator de escala } x_0 \Rightarrow 1 \text{ eV} = \frac{h^2}{(m_0 x_0)} = \frac{h^2}{(2\pi)^2(m_0 x_0)} \Rightarrow x_0 = 2.76042 \text{ \AA}$$

$$\text{b) massa efetiva adimensional para o material GaAs} = 0.067.$$

Conforme Eisberg e Resnick ([15]), os resultados da simulação do oscilador harmônico simples reproduzem os mesmos valores encontrados para o poço de potencial retangular.

Pode-se notar que, da mesma forma na simulação do poço de potencial, os valores esperados ([7], problema 10.1.2 - *Sturm-Liouville Eigenvalue Problem: Schrödinger Equation of a Particle in a Box*, pg 607) serão alcançados para um número maior de elementos, já que no poço de potencial o comprimento era de $200 \text{ \AA}$ e no oscilador é de $400 \text{ \AA}$.

A tabela 3.3.8 mostra os valores esperados para o caso do oscilador harmônico simples e os valores intermediários obtidos por simulação, ou seja, da mesma forma que no caso do poço de potencial os valores finais de cada autoestado será conseguido com simulações com maior número de intervalos, daí a apresentação de dois valores para indicar uma convergência para os valores esperados.



Valores Esperados	1751 elementos
0,25104652	0,2623620
	0,2493570
0,16393341	0,1685920
	0,1585210
0,09288457	0,0982816
	0,0911416
0,04140061	0,0433617
	0,0398838
0,01036079	0,0125236
	0,0085632

Tabela 3.3.8: Autovalores esperados e autovalores obtidos por simulação.

Capítulo 4

O Método EFGM - “Element Free Galerkin Method”.

Para muitos pesquisadores, a utilização tradicional do MEF (Método dos Elementos Finitos) é ferramenta usual para muitas aplicações e já não atende as necessidades de modelagem para problemas mais complexos, quer seja por apresentar dificuldades de discretização, quer por não apresentar excelente aproximação numérica nos casos em que a “malha” se torna complicada, por exemplo - modelagens de grandes deformações, malhas muito comprimidas ou em contornos muito irregulares. Ainda, o uso de malhas para modelagem em simulações de transformações de fase ou caminhos complexos, criam dificuldades no tratamento de descontinuidades quando não coincidem com as linhas da malha original. Claro está que estas dificuldades aumentam significativamente no caso 3D.

Para amenizar estas dificuldades, uma nova classe de métodos, que não requerem malhas para discretização do problema, têm sido desenvolvidos. Nestes métodos a construção das equações discretas e a descrição das superfícies interna e externa do modelo são desenvolvidas por meio dos conjuntos dos nós e não pelos elementos ou pela caracterização de interrelacionamento entre os nós. A grande atração dos métodos sem “malha” é a possibilidade de simplificação das adaptações em problemas com descontinuidades e contornos “quebrados”. É neste contexto que surge o Método EFGM - Element Free Galerkin Method.



4.1 O EFGM em uma dimensão

O EFGM é um método que não utiliza malhas de discretização, pois considera somente o conjunto dos nós e uma descrição dos modelos de contorno para gerar as equações discretas. A conectividade entre os nós e as funções de aproximação é construída pelo método. O EFGM utiliza uma aproximação de ajuste mínimo de mudança¹⁴ para aproximar a função $u(x)$ com $u^h(x)$. Estes aproximadores são construídos por três componentes: *uma função peso de suporte* associada a cada nó; *uma base*, usualmente uma base polinomial; e *um conjunto de coeficientes* dependentes da posição dos nós. A *função peso* é não zero sobre um pequeno subdomínio no entorno de um nó e é chamada suporte, a qual define a contribuição de aproximação para o nó. A envoltória dos domínios nodais de influência definem a conectividade nodal. Uma das propriedades dos aproximadores de ajuste mínimo de mudança é que sua continuidade está relacionada com a continuidade da função peso. No entanto, bases polinomiais de baixa ordem, por exemplo bases lineares, podem ser usadas para gerar aproximações altamente contínuas através da escolha apropriada da função peso.

4.1.1 Os aproximadores de ajuste mínimo de mudança

Considere-se uma discretização de um domínio $0 \leq x \leq 1$ dado por um conjunto de nós uniformemente distribuídos [12]. Cada nó tem um “*parâmetro nodal*” correspondente, ou u_I associado ao nó, e um parâmetro que governa a função no ponto, em geral $u_I \neq u(x_I)$. A aproximação $u^h(x)$ para a função $u(x)$ é vista como um polinômio de ordem m com coeficientes não constantes. A ordem do polinômio é definida como a ordem das bases. Em uma dimensão, e com bases lineares ou quadráticas, $u^h(x)$ podem ser escritas como:

$$u^h(x) = a_0(x) + a_1(x)x \quad (\text{base linear})$$

$$u^h(x) = a_0(x) + a_1(x)x + a_2(x)x^2 \quad (\text{base quadrática})$$

onde os parâmetros desconhecidos $a_j(x)$ variam de acordo com x . Estas aproximações são conhecidas como *interpoladores de ajuste mínimo de mudança* na curva e na superfície

¹⁴ No original, “Moving Least Square - MLS”



fixada. A aproximação local é dada por

$$u^h(x, \bar{x}) = \sum_{j=0}^m p_j(x) a_j(\bar{x}) = \mathbf{p}^T(x) \mathbf{a}(\bar{x}) \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{p}(x)$ é um polinômio completo de ordem m

$$\mathbf{p}^T(x) = [1 \quad x \quad x^2 \quad \dots \quad x^m] \quad (4.2)$$

e $\mathbf{a}(x)$ é dado por

$$\mathbf{a}^T(x) = [a_0(x) \quad a_1(x) \quad a_2(x) \quad \dots \quad a_m(x)] \quad (4.3)$$

Os parâmetros desconhecidos $a_j(x)$ para um ponto qualquer são determinados pela minimização da diferença entre a aproximação local no ponto e os parâmetros nodais u_I . Uma característica é que o ponto $\mathbf{x}$ recebe a sobreposição dos domínios de influência dos nós de 1 a n

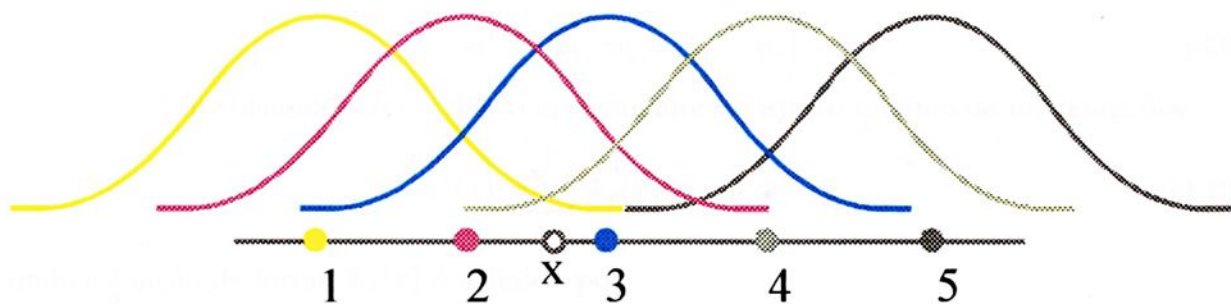


Figura 4.1.1: Sobreposição de domínios de influência no ponto X - uma dimensão

Para determinar $\mathbf{a}(x)$, minimizando os pesos em relação a $\mathbf{a}(x)$, a norma discreta L_2 é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum_{I=1}^n w(x - x_I) [u_L^h(x_I, x) - u_I]^2 \\ &= \sum_{I=1}^n w(x - x_I) [\mathbf{p}^T(x_I) \mathbf{a}(x) - u_I]^2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde n é o número de nós na vizinhança de x para os quais a função peso $w(x - x_I) \neq 0$, e u_I refere-se aos parâmetros nodais de u e $x = x_I$.

O mínimo J por 4.4 com respeito a $\mathbf{a}(x)$ leva ao seguinte conjunto de equações

lineares:

$$\mathbf{A}(x)\mathbf{a}(x) = \mathbf{B}(x)\mathbf{u} \quad (4.5)$$

ou de outra forma,

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{A}^{-1}(x)\mathbf{B}(x)\mathbf{u} \quad (4.6)$$

onde, no caso de base linear em uma dimensão,

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum w(x - x_I) \mathbf{p}(x_I) \mathbf{p}^T(x_I) \\ &= w(x - x_1) \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ x_1 & x_1^2 \end{bmatrix} + w(x - x_2) \begin{bmatrix} 1 & x_2 \\ x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} + \dots + w(x - x_n) \begin{bmatrix} 1 & x_n \\ x_n & x_n^2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.7)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(x) &= [w(x - x_1)\mathbf{p}(x_1), w(x - x_2)\mathbf{p}(x_2), \dots, w(x - x_n)\mathbf{p}(x_n)] \\ &= \left[w(x - x_1) \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \end{bmatrix} \quad w(x - x_2) \begin{bmatrix} 1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad \dots \quad w(x - x_n) \begin{bmatrix} 1 \\ x_n \end{bmatrix} \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

e

$$\mathbf{u}^T = [u_1, u_2, \dots, u_n] \quad (4.9)$$

Substituindo 4.6 em 4.1, o aproximador de ajuste mínimo de mudança fica

$$u^h(x) = \sum_{I=1}^n \Phi_I(x) u_I = \Phi(x)\mathbf{u} \quad (4.10)$$

onde a função de forma $\Phi_I(x)$ é definida por

$$\Phi_I(x) = \sum_{j=1}^m p_j(x) (\mathbf{A}^{-1}(x)\mathbf{B}(x))_{jI} = \mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_I \quad (4.11)$$

onde m é a ordem do polinômio $p(x)$. Para determinar as derivadas de 4.10, é necessário obter-se as derivadas da função de forma. As derivadas no espaço da função de forma são obtidas por

$$\begin{aligned} \Phi_{I,x} &= (\mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_I)_{,x} \\ &= \mathbf{p}^T_{,x} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_I + \mathbf{p}^T (\mathbf{A}^{-1})_{,x} \mathbf{B}_I + \mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_{I,x} \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde

$$\mathbf{B}_{I,x}(x) = \frac{dw}{dx}(x - x_I) \mathbf{p}(x_I) \quad (4.13)$$

e $\mathbf{A}^{-1}_{,x}$ é computado por

$$\mathbf{A}^{-1}_{,x} = -\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_{,x} \mathbf{A}^{-1} \quad (4.14)$$

onde

$$\mathbf{A}_{,x} = \sum_{I=1}^n w(x - x_I) \mathbf{p}(x_I) \mathbf{p}^T(x_I) \quad (4.15)$$

$$\frac{dw}{dx}(x - x_1) \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ x_1 & x_1^2 \end{bmatrix} + \frac{dw}{dx}(x - x_2) \begin{bmatrix} 1 & x_2 \\ x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} + \dots + \frac{dw}{dx}(x - x_n) \begin{bmatrix} 1 & x_n \\ x_n & x_n^2 \end{bmatrix}$$

Pode-se notar que as funções de forma do EFGM não satisfazem o critério do delta de Kronecker: $\Phi_I(x_j) \neq \delta_{IJ}$, daí a denominação de *aproximadores* em substituição a *interpoladores*. Então, $u^h(x_I) \neq u_I$, isto é, os parâmetros nodais u_I não são os valores nodais $u^h(x_I)$. A aproximação do deslocamento do I ésimo nó depende do parâmetro nodal u_I de forma que todos os nós, u_1 até u_n , correspondem a todos os outros nós sob o domínio de influência do nó I . O somatório de 4.10 mostra isso. Dessa forma, fica mais complicado, se comparado ao MEF, a imposição das condições de contorno. Algumas técnicas vêm facilitar a validação das condições de contorno: multiplicadores de Lagrange, princípio variacional modificado e conexão com elementos finitos.

Um dos fatores importantes no EFGM é a função peso utilizada. Esta deverá ser não zero em uma pequena vizinhança de x_I , chamada de domínio de influência do nó I , de modo a gerar um conjunto esparsa de equações discretas; ou seja, como se ela se comportasse como um suporte compacto. É obrigatório que $w(x - x_I)$ seja positiva e monotônica crescente se $\|x - x_I\|$ for decrescente; além disso, é desejável que $w(x - x_I)$ seja uniforme: se $w(x - x_I)$ é contínua na 1ª derivada (C^1) para a base polinomial, então a função de forma $\Phi_I(x)$ também será contínua (para C^1).

Dependendo da escolha da função peso $w(x - x_I)$ pode-se afetar o resultado da aproximação de $u^h(x)$. Como ilustração, tome-se 9 nós uniformemente espaçados, então pode-se construir uma aproximação de ajuste mínimo de mudança $u^h(x)$ usando uma base polinomial linear $\mathbf{p}^T = [1, x]$. A representação da função peso foi considerada para o nó 5 ao longo de todo o domínio (ver também [12]). Assim, tem-se:

i) se a função peso for escolhida constante sobre todo o domínio, o processo de minimização para cada ponto x envolve todos os pontos do domínio e $\mathbf{J}(x)$ em 4.4 se transforma em um ajuste mínimo padrão, resultando um polinômio linear uma reta) entre os pontos dados;

ii) se os pesos forem constantes mas cada função peso nodal possuir um suporte

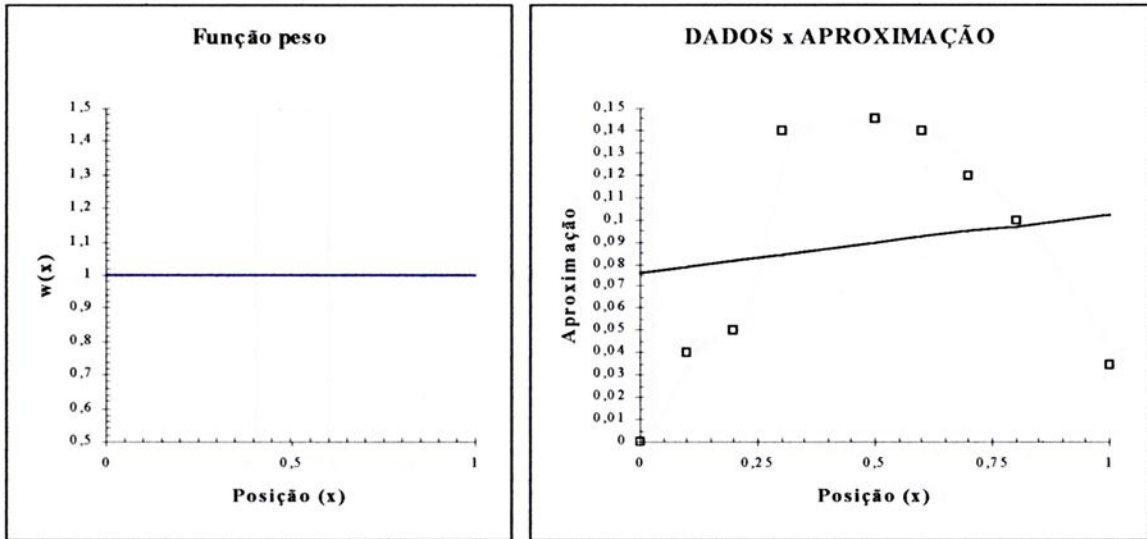


Figura 4.1.2: Função peso constante e aproximação $u^h(x)$

compacto não zero centrado no nó, e o tamanho do subdomínio for escolhido de forma que somente dois nós contribuam para cada ponto x , ($n = m = 2$), então as funções peso geram uma interpolação linear por pedaços tal como no método dos elementos finitos. Desta forma a minimização fica sendo local e inclui apenas os vizinhos, tornando a aproximação um polígono que contém os pontos dados.

iii) se as funções são uniformes mas cobrem um subdomínio maior ($n > m$), a minimização $J(x)$ em 4.4 resulta em um tipo de aproximação de ajuste mínimo de mudança que é o utilizado pelo EFGM. A aproximação é contínua e uniforme através da base polinomial.

Definindo-se $d_I = ||x - x_I||$ e $r = \frac{d_I}{d_{mI}}$, onde d_{mI} é o tamanho do domínio de influência do $I_{ésimo}$ nó, a função peso pode ser formulada como uma função normalizada do raio r . Conforme [12], uma aplicação de boa aproximação é a função peso *cubicspline*,

$$w(x - x_I) \equiv w(r) = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4r^2 + 4r^3 & \text{para } r \leq \frac{1}{2} \\ \frac{4}{3} - 4r + 4r^2 - \frac{4}{3}r^3 & \text{para } \frac{1}{2} < r \leq 1 \\ 0 & \text{para } r > 1 \end{cases} \quad (4.16)$$

dada graficamente pela figura 4.1.5.

O tamanho do domínio de influência para um nó, d_{mI} , é computado por $d_{mI} = d_{\max} c_I$, onde $d_{\max}$ é um parâmetro de escala, tipicamente de 2,0 a 4,0. A distância c_I é

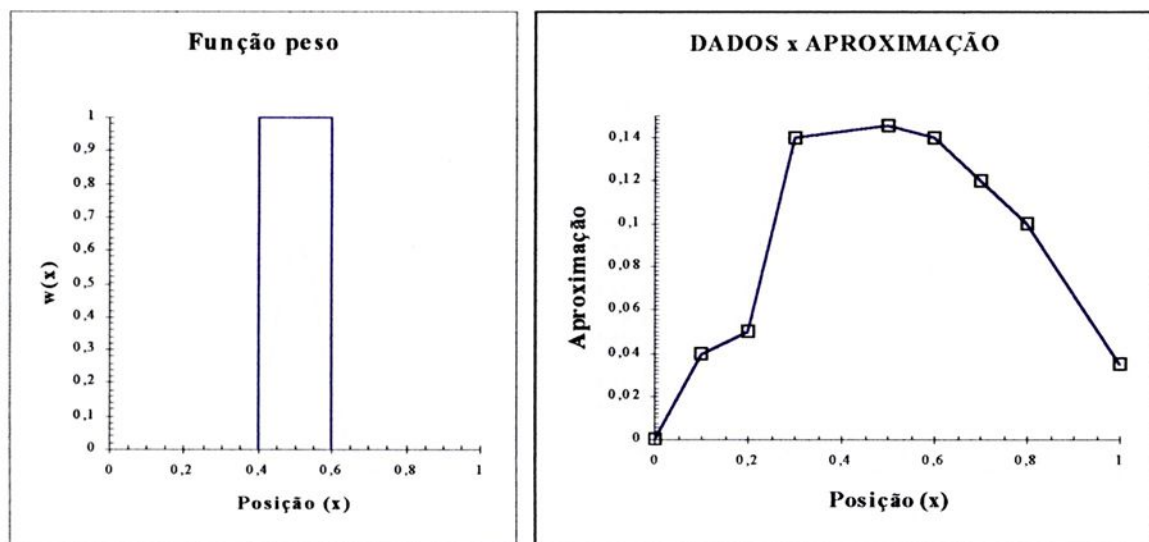


Figura 4.1.3: Função peso constante com suporte compacto e aproximação $u^h(x)$

determinada observando-se os nós vizinhos de **A**. Em uma dimensão, e com bases lineares, a distância c_I ao nó é a máxima distância ao vizinho mais próximo, assegurado que cada nó tenha pelo menos dois vizinhos no domínio de influência.

Com referência às equações 4.13 e 4.14, nota-se que a derivada espacial da função peso é necessária para computar a derivada espacial das matrizes **A** e **B**. Usando as regras de derivação, tem-se

$$\frac{dw_I}{dx} = \frac{dw_I}{dr} \frac{dr}{dx} = \begin{cases} [\text{senal de } (x - x_I)] & (-8r + 12r^2) \\ [\text{senal de } (x - x_I)] & (-4 + 8r - 4r^2) \\ 0 & \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{para } r \leq \frac{1}{2} \\ \text{para } \frac{1}{2} < r \leq 1 \\ \text{para } r > 1 \end{array} \quad (4.17)$$

cujas derivadas são contínuas sobre todo o domínio.

4.1.2 Formulação no EFGM para a equação de Schrödinger em uma dimensão.

A equação de Schrödinger 1.12, suas propriedades e especificidades, já foi apresentada nos capítulos 1 e 2. A aplicação do EFGM a um sistema quântico depende de algumas considerações. Genericamente, as coordenadas de posição dependem dos coeficientes $\{a_j(x)\}$ que são determinadas minimizando uma norma discreta L_2 definida por um

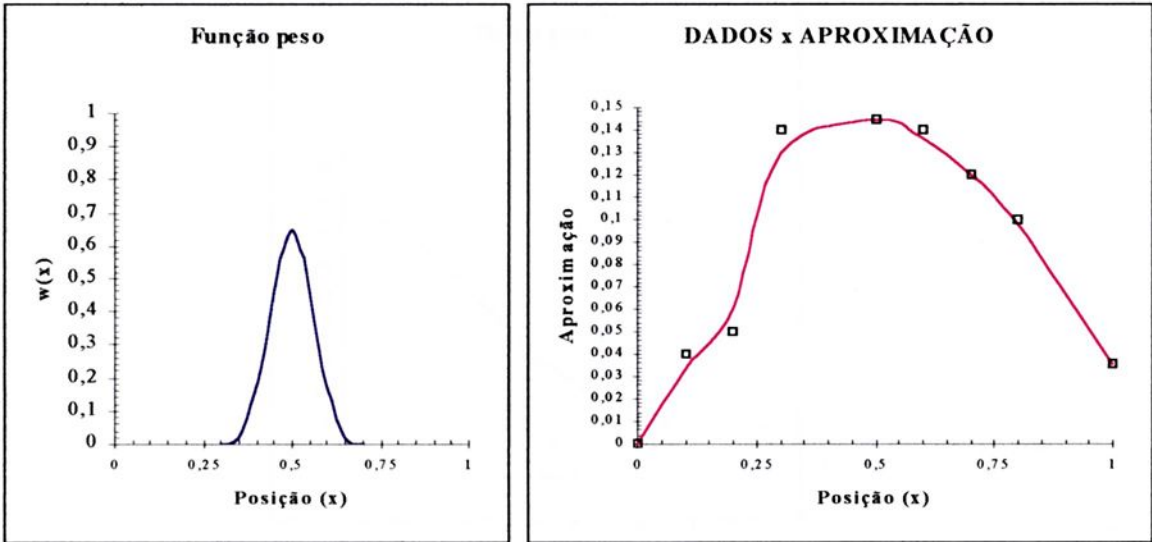


Figura 4.1.4: Função peso contínua e aproximação $u^h(x)$

conjunto de pontos $\{x_I\}$ ($I = 1, 2, \dots, n$) e está associada aos valores nodais u_I , como mostrado em 4.4. A condição estacionária de $\mathbf{J}(x)$ em relação a $\mathbf{a}(x)$, $\partial \mathbf{J} / \partial \mathbf{a} = 0$ leva à equação 4.5 e conseqüentes 4.7 e 4.8.

A condição estacionária (equação 4.5) é avaliada para todo ponto x o qual não necessariamente coincide com um dos nós do EFGM. Diferenciando a equação 4.11, primeira ordem, temos

$$\frac{d\Phi_I}{dx} = \sum_{j=0}^m \left[\frac{dp_j(x)}{dx} (\mathbf{A}^{-1}(x) \cdot \mathbf{B}(x))_{jI} + p_j(x) \left(\frac{d\mathbf{A}^{-1}(x)}{dx} \cdot \mathbf{B}(x) + \mathbf{A}^{-1}(x) \cdot \frac{d\mathbf{B}(x)}{dx} \right)_{jI} \right], \quad (4.18)$$

onde

$$\frac{d\mathbf{A}^{-1}(x)}{dx} = \mathbf{A}^{-1}(x) \cdot \left(\frac{d\mathbf{A}(x)}{dx} \right) \cdot \mathbf{A}^{-1}(x). \quad (4.19)$$

No caso da equação de Schrödinger, equação 1.12, para um poço de potencial ou barreira de potencial (já apresentados no capítulo 2), a análise dos autoestados é feita utilizando-se a equação 4.11 com o respectivo funcional modificado, conforme [27], para forçar as condições de Dirichlet através dos multiplicadores de Lagrange λ em um domínio finito unidimensional, obtendo-se:

$$F = \sum_i \sum_j u_i u_j \int_a^b \frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{d\Phi_i}{dx} \frac{d\Phi_j}{dx} dx + \sum_i \sum_j u_i u_j \int_a^b U(x) \Phi_i \Phi_j dx -$$

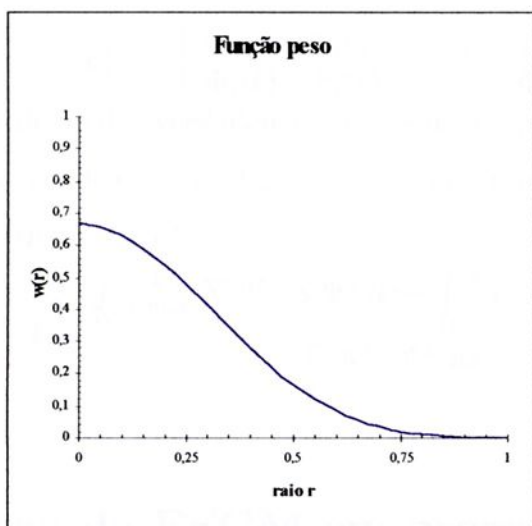


Figura 4.1.5: Função peso cubico spline sobre o raio normalizado

$$-E \sum_i \sum_j u_i u_j \int_a^b \Phi_i \Phi_j dx + \lambda_a \left(\sum_i u_i \Phi_i(a) - \Psi_a \right) + \lambda_b \left(\sum_i u_i \Phi_i(b) - \Psi_b \right). \quad (4.20)$$

As soluções em termos do EFGM são expressas por

$$\Psi^h(x) = \sum_{i=1}^n u_i \Phi_i(x) = \mathbf{u} \Phi(x), \quad (4.21)$$

que no caso de um poço de potencial deve satisfazer a condição de contorno de Dirichlet homogênea, ou seja, as funções de onda decaem para zero nas bordas.

As equações finais discretas da solução aproximada de $\mathbf{u}$ da equação 4.21 são obtidas, para o correspondente problema de autovetores, os aproximadores nodais e os multiplicadores de Lagrange λ_i , através do seguinte sistema linear apresentado na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \frac{\lambda}{\lambda} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \mathbf{T} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \frac{\lambda}{\lambda} \end{bmatrix}, \quad (4.22)$$

onde

$$\mathbf{K} = K_{i \ j} = \int_a^b \frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \frac{d\Phi_i}{dx} \frac{d\Phi_j}{dx} dx + \int_a^b U(x) \Phi_i \Phi_j dx, \quad (4.23)$$

$$\mathbf{T} = T_{i \ j} = \int_a^b \Phi_i \Phi_j dx \quad (4.24)$$

e

$$\mathbf{G}^T = \begin{bmatrix} \Phi_1(a) & \Phi_2(a) & \dots & \dots & \Phi_n(a) \\ \Phi_1(b) & \Phi_2(b) & \dots & \dots & \Phi_n(b) \end{bmatrix}. \quad (4.25)$$

Para o cálculo dos verdadeiros valores físicos para esta aplicação da equação de Schrödinger, a expansão da equação 4.21 é utilizada novamente para produzir os verdadeiros autovalores para a equação 1.12:

$$k = \frac{\int_{\Omega} \frac{\hbar^2}{2 m_{eff}} \nabla \Psi^h \cdot \nabla \Psi^h dx + \int_{\Omega} U(x) \Psi^h \cdot \Psi^h dx}{\int_{\Omega} \Psi^h \cdot \Psi^h dx} \quad (4.26)$$

4.2 Aplicação do EFGM em programa MATLAB para simulação de resultados do poço de potencial e oscilador harmônico

Para simulação dos autoestados através do EFGM, em um poço de potencial e oscilador harmônico, será utilizado o software MATLAB, uma linguagem semelhante ao FORTRAN que apresenta muita facilidade no tratamento de matrizes. De forma resumida, os passos a serem considerados são (figura 4.2.6):

1º Passo: A configuração das coordenadas e o número de células de integração são definidas espaçando-se os nós uniformemente ao longo da largura do poço de potencial.

2º Passo: Fixa-se os parâmetros para a função peso, incluindo a variável $d_{\max}$ com 2,0 para uso na determinação de d_{mI} para cada nó. Por serem os nós uniformemente espaçados, a distância c_I será a mesma que a entre os nós; d_{mI} tem o mesmo valor para cada nó e é igual a $d_{\max} c_I$.

3º Passo: As células de integração são escolhidas de forma a coincidir com os intervalos entre os nós e a quadratura a ponto (equivalente à regra do trapézio) é utilizada para integrar a forma simplificada de Galerkin. Por ser uniformemente espaçados os nós, o jacobiano tem o mesmo valor para cada célula e é igual à metade da distância entre os nós. As posições dos pontos de integração, seus respectivos pesos e o jacobiano são armazenados em um vetor chamado **gg** com primeiro valor valendo 0,0. Este é o ponto onde a condição de contorno essencial é imposta e na iteração dos pontos de integração será usado para



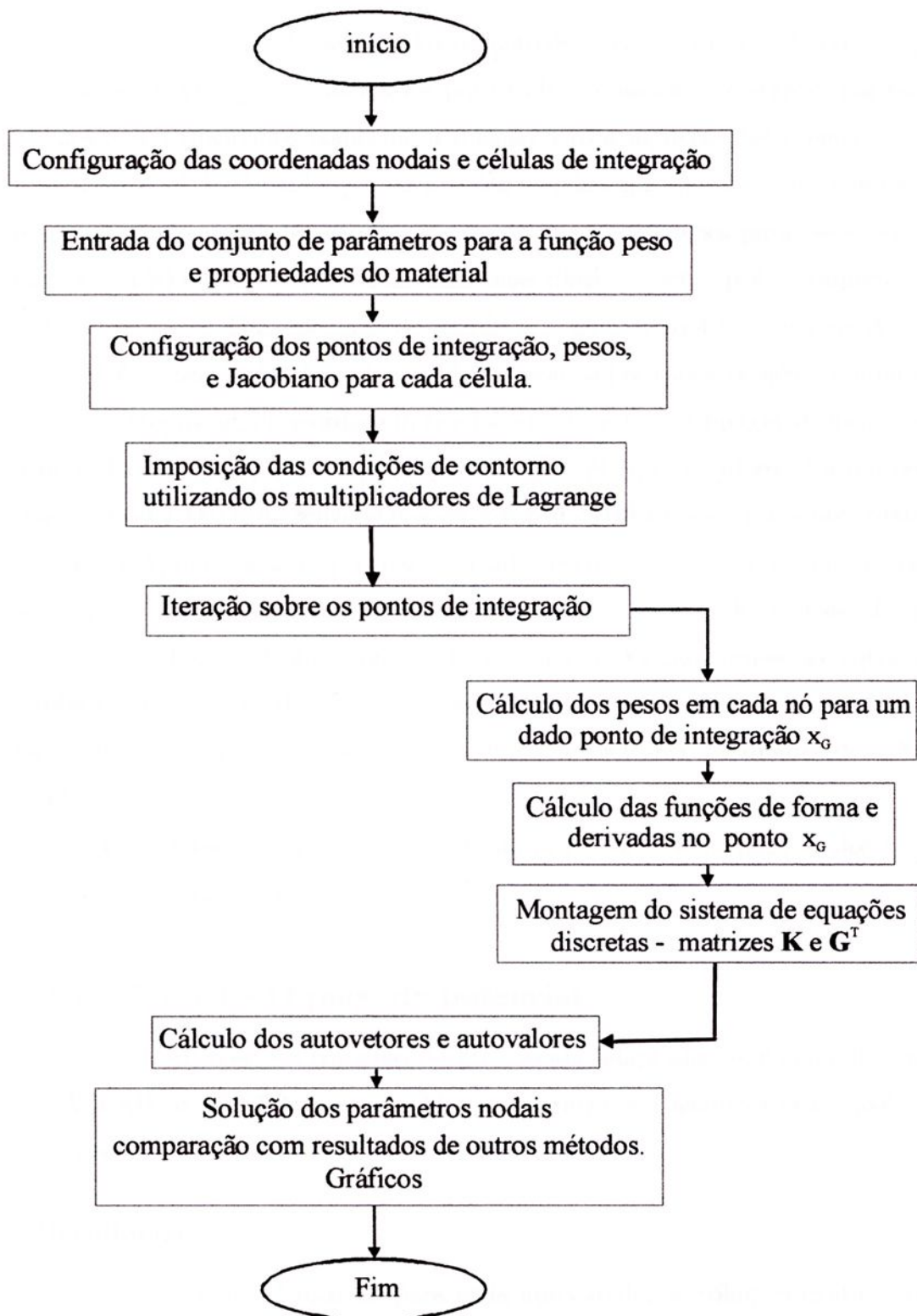


Figura 4.2.6: Diagrama de blocos - programa EFGM

montagem da matriz **G**.

4º Passo: A distância entre o ponto de integração x_G e cada nó é calculada; o peso w e sua derivada $\frac{dw}{dx}$ são calculados para cada nó usando a distância normalizada $\frac{\|x-x\|}{d_{ml}}$. Os pesos são calculados conforme a relação 4.16 e as derivadas espaciais são calculadas utilizando 4.17, lembrando que para todos os nós cujos domínios não contêm o ponto x_G , os pesos e suas derivadas são zero; ou seja, as contribuições para esses nós na forma de Galerkin 4.20 serão zero. Usando uma base linear, o vetor **p** é o conjunto $[1 \ x_1]^T$ para cada nó; a matriz **B** é calculada de acordo com a equação 4.8 e a matriz **A** e sua derivada espacial **A**_{,x} são montadas, através da iteração sobre todos os nós no domínio para cada ponto de integração, de acordo com as equações 4.7 e ???. As funções de forma são calculadas utilizando-se a equação 4.12; $\mathbf{p}^T = [1 \ x]$, $\mathbf{p}_{,x}^T = [0 \ 1]$ e os valores das funções de forma e suas derivadas são armazenadas nos vetores **phi** e **dphi** respectivamente. Mais uma vez, as funções de forma e suas respectivas derivadas correspondentes, em cada nó, são calculadas no ponto de integração e as contribuições à matriz de rigidez **K** 4.23 são determinadas.

5º Passo: Com a matriz **K** e a matriz **G** montam-se as equações discretas; impõe-se as condições de contorno e os multiplicadores de Lagrange (no caso do oscilador harmônico não são usados os multiplicadores de Lagrange); e finalmente calcula-se os autovalores.

6º Passo: Conclui-se a simulação produzindo-se os gráficos dos autoestados encontrados pelo programa.

4.2.1 Caso 1 - O poço de potencial

Com base no trabalho de [27], foram adaptadas as rotinas do programa para o MATLAB, versão 5.3 para o problema descrito por Nakamura et al ([30], pg 892). Ver apêndice C.

Resultados

A tabela ?? mostra, para cada autoestado, as soluções exata, a calculada por Nakamura et al utilizando elementos finitos através de uma aproximação Hermitiana, a calculada no capítulo anterior utilizando elementos finitos através de uma aproximação



linear e a calculada por EFGM com aproximação cubicspline.

Auto estado	Solução Exata	MEF (Hermite) 92 elementos	MEF (linear) 1751 elementos	EFGM 61 nós (meV)	EFGM 601 nós (meV)
1	9.9671761	8.29468	9.62988	9.8847	9.9646
2	39.7718097	38.0545	39.5654	39.4734	39.7620
3	88.9335308	82.9468	89.3115	88.4018	88.9131
4	155.6079531	155.587	154.6865	155.1030	155.586208

Tabela 4.2.1: Comparativo entre o MEF e o EFGM

Este comparativo destaca bem a quantidade de elementos necessários para se conseguir aproximações para os mesmos autoestados. As melhores aproximações são quando utilizam-se funções de aproximação cúbicas (cubcspline e hermitiana), e as piores quando utiliza-se uma função de aproximação linear.

Gráficos

As funções de onda para cada autoestado estão mostradas na figura 4.2.7.

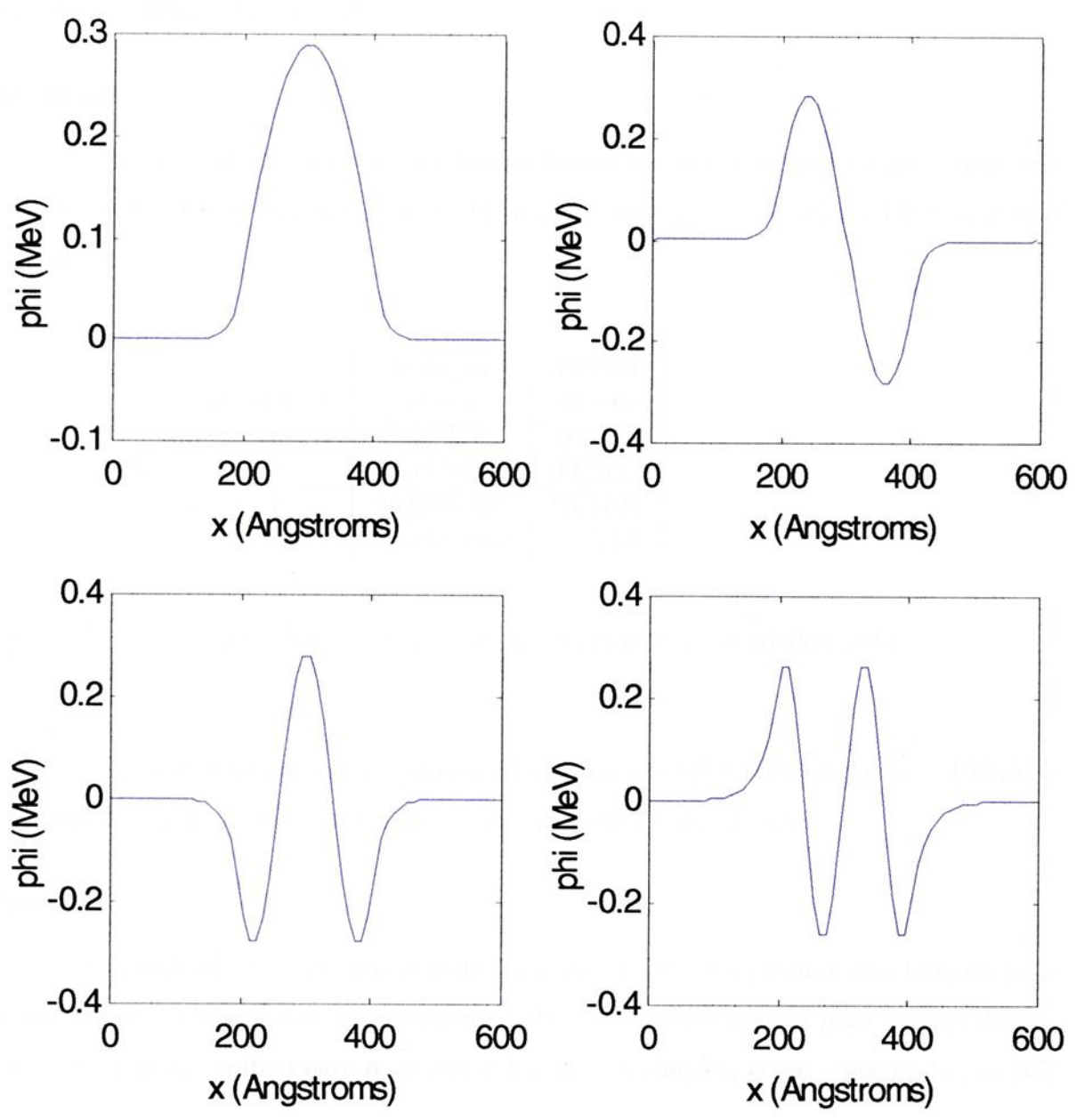


Figura 4.2.7: Representação dos autoestados para o poço de potencial - EFGM

4.2.2 Caso 2 - O oscilador harmônico clássico.

De forma análoga, o problema do oscilador harmônico simples foi simulado utilizando-se o mesmo valor de potencial que o utilizado para o poço de potencial. O programa está descrito no apêndice D.

Resultados

Os resultados esperados, da mesma forma que o comentado na simulação utilizando o MEF, são os mesmos que os do poço de potencial. A tabela 4.2.2 mostra o comparativo.

autoestado	Solução exata	EFGM 81 nós
1	9,9671761	9,7253
2	39,7718097	39,2412
3	88,9335308	88,1135
4	155,6079531	154,5126

Tabela 4.2.2: Comparativo entre os valores esperados e simulados pelo EFGM.

Da mesma forma que na simulação utilizando o MEF, também para o EFGM a quantidade de nós deve aumentar para se conseguir uma boa aproximação.

Gráficos

O resultado das simulação pode ser vista através dos gráficos das funções para cada autoestado. Constata-se a semelhança entre o resultado gráfico para o poço de potencial e o resultado gráfico para o oscilador harmônico simples, como comentado por [15] e [29].

Conclusão

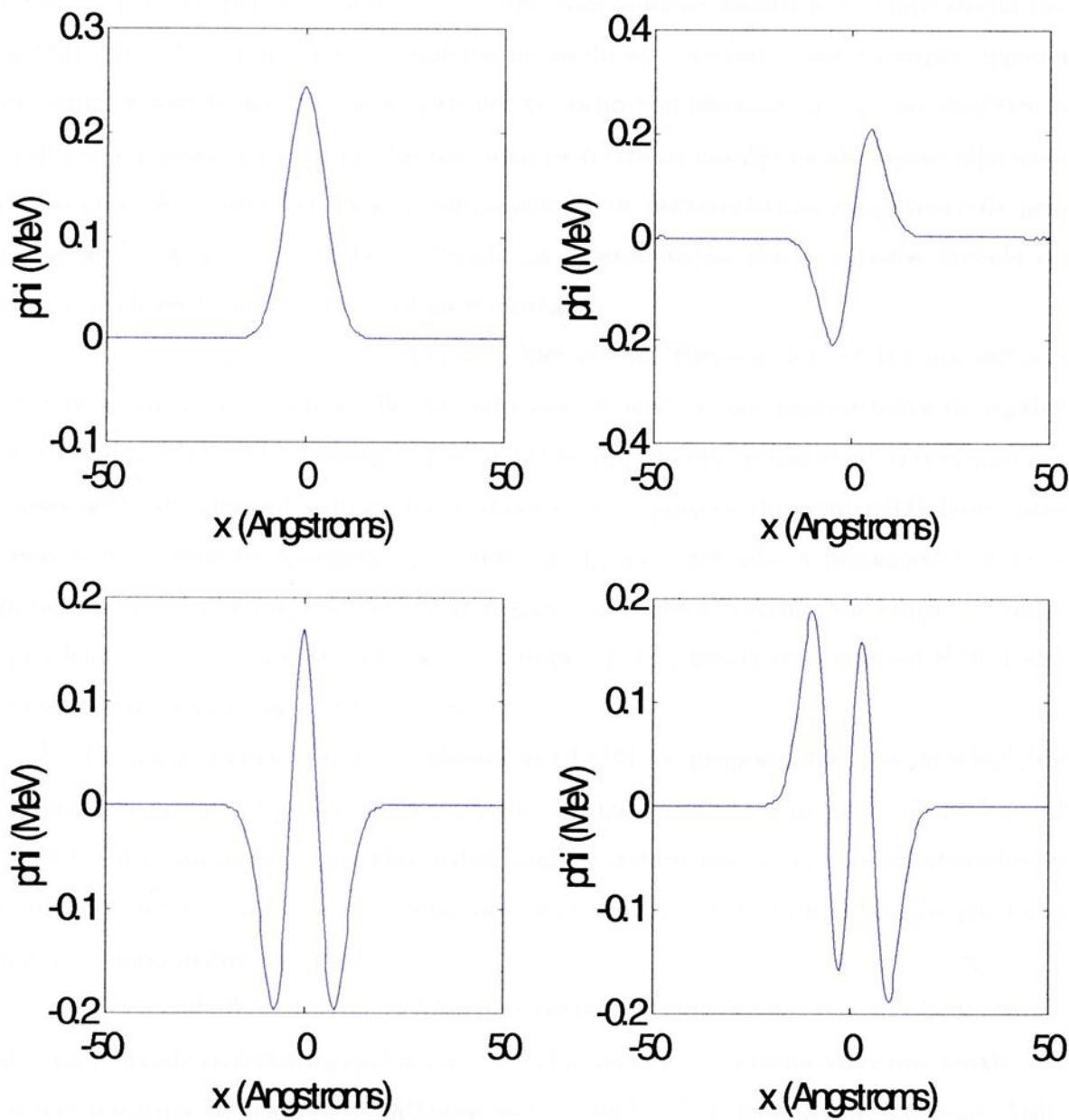


Figura 4.2.8: Representação dos autoestados para o oscilador simples - EFGM

Conclusão

O estudo da equação de Schrödinger para o caso unidimensional independente do tempo é, para os físicos, matéria elementar com solução analítica e comprovação experimental. No entanto, quando o problema deixa de ser "trivial", por exemplo equação de Schrödinger não linear com situações de contorno complicadas, a solução analítica é muito difícil, ou quase impossível. Nestes casos os métodos numéricos são muito eficientes e torna-se necessária uma ferramenta computacional de características amigáveis e de precisão aceitável. Além disso, a versatilidade na representação dos resultados através de planilhas e gráficos é outra característica importante.

Neste trabalho foi mostrado que o Método dos Elementos Finitos é um método que considera um meio contínuo discretizado por elementos com propriedades de rigidez e aspectos conceituais bem definidos. Não consiste apenas em transformar o contínuo em uma associação de elementos discretos e escrever as equações de compatibilidade entre eles, mas admitir funções contínuas que representam, por exemplo, a propagação de uma "onda de matéria" por um meio sólido e, a partir daí, obter o estado da função de onda correspondente que associada às relações de campo eletromagnético, permitem definir seu comportamento ao longo de todo o sistema.

De outra forma, um novo método, o EFGM, se propõe a facilitar as restrições de aplicação do método dos elementos finitos ao utilizar pontos em lugar de elementos. O método EFGM é um método que não utiliza malhas (estruturadas ou não estruturadas) e por isso tem a vantagem de não se limitar aos casos onde é possível discretização por meio de malhas, como é o caso do MEF.

Neste trabalho também foi feita uma revisão de alguns conceitos do cálculo variacional, o qual estuda os métodos que permitem achar os valores extremos dos funcionais. As leis da mecânica que aplicam esses métodos são chamadas de princípios variacionais. Aplicando esses princípios aos problemas discretizados pelos elementos finitos, pode-se resolver muitas aplicações na área de eletrônica e engenharia em geral.

Por se tratar de um método aproximado de solução para comportamento de modelos matemáticos complexos por meio de cálculo variacional, fez-se necessário uma abordagem dos métodos de Rayleigh-Ritz e especificamente o de Galerkin. Dessa forma,



procurou-se conceitua-los através de preliminares matemáticas, tais como os espaços de Sobolev [9] e o próprio desenvolvimento de equações diferenciais aplicado ao problema de mecânica quântica - o poço de potencial [2] e o oscilador harmônico simples.

A partir de soluções já produzidas por autores como [15] e [18], e implementadas em computadores de grande porte através de linguagens para a engenharia como o FORTRAN [3] e [23], procurou-se adequar o problema a uma aplicação em microcomputador pessoal utilizando uma ferramenta computacional de fácil manuseio e bastante voltada para a área de matemática aplicada - os softwares *Mathematica* e *Matlab*.

Os resultados apresentados são uma primeira integração de rotinas adaptadas para utilização no Método dos Elementos Finitos e EFGM, desenvolvidas por autores como [7], [19] e [39], dentre outros, utilizando métodos consagrados pela física de partículas .

Para o estudo dos métodos, optou-se pelo estudo de casos relativamente simples e procurou-se desenvolver, de forma bastante elementar, o que é encontrado em vários trabalhos de renomados autores onde a preocupação maior é a análise dos resultados e não o estudo de como se obter os resultados. As rotinas de programação aqui mostradas atêm-se a algoritmos bastante singelos cujo objetivo é proporcionar uma relação imediata entre o modelo matemático proposto e as ferramentas menos elaboradas dos softwares utilizados.

Muitas outras propostas se apresentam para a continuidade do trabalho, algumas já em estudos, tais como uma maior rapidez de convergência por meio de aproximações quadrática, cúbica e hermitiana para o caso unidimensional, e a seguir para os casos em que a discretização dos elementos é por meio de superfícies (triângulos, por exemplo) ou meio de volumes (tetraedros, por exemplo).

Tanto para o método dos Elementos Finitos quanto para o EFGM muito ainda pode ser pesquisado, quer no tocante às malhas apropriadas aos vários problemas, para o MEF, quer no que se refere às funções passo e peso no EFGM.



Referências Bibliográficas

- [1] ABELL, Martha L.; BRASELTON, James P.. "*Mathematica by Exemple*". New York: Academic Press, 1993.
- [2] ADAMS, R. A.. "*Sobolev Spaces*". New York: Academic Press, 1985.
- [3] AKIN, J. E.. "*Application and Implementation of Finite Element Methods*". San Diego: Academic Press, 1982.
- [4] ANDO, Yuji; ITOH, Tomohiro. "*Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potencial barriers*". Journal Applied Phisics, vol. 61, n°4, pp. 1497, 15 de fevereiro de 1987.
- [5] ASSAN, Aloísio Ernesto. "*Método dos Elementos Finitos*". São Paulo: Editora da Unicamp, 1999.
- [6] BAUMANN, Gerd. "*Mathematica in Theoretical Phisics*". New York: Telos - Springer Verlag, 1996.
- [7] BHADER, Thomas B.. "*Mathematica for Scientists and Engineers*". New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1995.
- [8] BLACHMAN, Nancy. "*Mathematica - uma abordagem prática*". Rio de Janeiro: Editora Prentice-Hall do Brasil, 1996.
- [9] BRENNER, Suzanne C.; SCOTT, L. Ridgeway. "*The Mathematical Theory of Finite Element Methods*". New York: Springer-Verlag, 1994.
- [10] BUTKOV, Eugene. "*Física Matemática*". Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1988.
- [11] DHATT, Gouri; TOUZOT, Gilbert. "*Une présentation de la méthode des éléments finis*". Paris: Maloine S. A. Editeur, 1984.
- [12] DOLBOW, John; BELYTSCHKO, Ted. "*An Introduction to Programing the Meshless Element Free Galerkin Method*". <http://tamo.mecn.nwu.edu>, Computational Mechanics group, Northwestern University, 1998.
- [13] DUQUESNE, Maurice. "*Matéria e Antimatéria*". Lisboa: Edições 70, 1986.



- [14] EINSTEIN, Albert; INFELD, Leopold. *"A Evolução da Física"*. Rio de Janeiro: Zahar Editores, 1976.
- [15] EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. *"Física Quântica"*. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1994.
- [16] FRIEDMAN, A.. *"Partial Differential Equations "*. New York: R. E. Krieger Publishing Co, 1976.
- [17] FRITZ, I. J.. *"Energy levels of finite-depth quantum wells in a electric field "*. Journal Applied Phisics, vol. 61, nº6, pp. 2273, 15 de março de 1987
- [18] GASIOROWICS, Stephen. *"Física Quântica"*. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1997.
- [19] GASS, Richard. *"Mathematica for Scientists and Engineers"*. New York: Prentice Hall, 1998.
- [20] GLEISER, Marcelo. *"A dança do Universo"*. São Paulo: Companhia das Letras, 1997.
- [21] GOLOSKIE, R.; KRAMER, J. W.; RAM-MOHAN, L. R.. *"Quantum-Mechanical Tunneling and Finite Elements"*. Computer in Phisics, vol. 8, nº6, pp. 679, nov/dec 1994.
- [22] HAYATA, K.; KOSHIBA, M.; NAKAMURA, K.; SHIMIZU, K.. *"Eigenstate calculation of quantum well struture using the finite elements "*. Eletronic Letter, vol. 24, nº10, pp. 889, may 1989.
- [23] HINTON, E.; OWEN, D. R.. *"Finite Element Programming "*. San Diego: Academic Press, 1977.
- [24] KOJIMA, Keisuke; MITSUNAGA, Kazumasa; KYUMA, Kazuo. *"Calculation of two-dimensional quantum-confined strutures using the finite element method "*. Applied Phisycs Letter, vol. 55, nº9, pp. 882, 28 august 1989.
- [25] KOSHIBA, Masanori. *"Optical Waveguide Theory by Finite Element Methods"*. New York: Kluwer Academic Publishers, 1993.
- [26] LANDAU, L.; LIFCHITZ, E.. *"Teioria do Campo"*. São Paulo: Hemus, s/d.
- [27] MACHADO, José Márcio; FRANCO, Marcos A. R.; PASSARO, Ângelo. *"Resultados Preliminares para o Oscilador Harmônico Isotrópico"*. Relatório interno, UNESP-IBILCE-DCCE - junho, 1997.
- [28] MACHADO, José Márcio; SHIYOU, Yang; PASSARO, Ângelo; ABE, Nancy M.. *"An Application of Element Free Galerkin Method to the Analysis of Quantum Well Strutures"*.



Tianjin, China: Reports of The Fourth International Conference on Electromagnetic Field Problems and Applications, pg 59, setembro, 2000

- [29] MERZBACHER, Eugen. *"Quantum Mechanics "*. New York: Wiley, John & Sons, 1969.
- [30] NAKAMURA, Kenji; SHIMIZU, Akira; KOSHIBA, Masanori; HAYATA, Kazuia. *"Finite-Element Analysis of Quantum Wells of Arbitrary Semiconductors with Arbitrary Potencial Profiles"*. IEEE Journal of Quantum Eletronics, vol. 25, n°5, pp. 889, may 1989.
- [31] NAKAMURA, Kenji; SHIMIZU, Akira; KOSHIBA, Masanori; HAYATA, Kazuia. *"Finite-Element Calculation of the Transmission Probability and Resonant-Tunneling Lifetime Through Arbitrary Potencial Barriers"*. IEEE Journal of Quantum Eletronics, vol. 27, n°5, pp. 1189, may 1991.
- [32] NORRIE, Douglas H.; VRIES, Gerard de. *"The Finite Element Method"*. New York: Academic Press Inc., 1973.
- [33] SZABO, Barna; BABUSKA, Ivo. *"Finite Element Analysis"*. New York: Jhon Wiley & Sons Inc., 1991.
- [34] SCHWARZ, H. R.. *"Finite Element Methods"*. London: Academic Press Inc., 1988
- [35] SHAW, Willian T.; TIGG, Jason. *"Applied Mathematica"*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [36] SILVESTER, Peter P.; FERRARI, Ronald L. *"Finite Elements for Electrical Engineers"*. New York: Cambridge University Press, 1996.
- [37] SUGAWARA, M. *"Adaptive Basis set for Quantum-Mechanical Calculation Based on Element-free Galerkin Method"*. Chemical Phisics Letters, 314, pg 522-528, 1999.
- [38] VETTERLING, Willian T.; PRESS, Willian H.; TEUKOLSKY, Saul A.; FLANNERY, Brian P.. *"Numerical Recipes"*. New York: Cambridge University Press, 1997.
- [39] WICKHAN-JONES, Tom. *"Mathematica Graphics"*. New York: Telos - Springer Verlag, 1994.
- [40] WOLFRAM, Stephen. *"The Mathematica Book"*. New York: Wolfram Media - Cambridge University Press, 1996.
- [41] ZIENKIEWICZ, O. C.. *"The Finite Element Method "*. London: McGraw-Hill, 1977.
- [42] ZIMMERMAN, Robert L.; OLNES, Fredrick I.. *"Mathematica for Physics"*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.



Apêndice A

Rotina no Mathematica para a determinação dos autoestados em um poço de potencial utilizando MEF.

(* **Problema de autovalores - determinação dos autoestados em um poço potencial com aproximação linear** *)

```

m_eff = (0.067 + 0.083 y) m_0      (* massa em um elemento de GaAs/AlxGa1-x *)
c = 2.998 108                      (* velocidade da luz em m/s *)
m_0 = 0.511 106 / c2              (* massa de um elétron livre em eV *)
y = 0                               (* fator para aproximação da massa específica *)
m_par = m_eff / m_0                 (* massa parametrizada *)
h = 4.136 (10-15)                  (* constante de Planck em eV *)
f_0 = 2.76042899                    (* fator de normalização em metros (Å) *)

(0.067 + 0.083 y) m_0
2.998 × 108
5.68536 × 10-12
0
0.067
4.136 × 10-15
2.76043

nelem = 201                          (* número de elementos lineares *)
201

larg = 100 10-10                    (* largura do poço em metros (Å ângstrons) *)
1
1000000000

U_0 = 0.3                            (* potencial na borda do poço em eV *)
0.3

u = Compile[{x, larg/2}, If[Abs[x] < larg/2, 0.0, 0.3]]
CompiledFunction[{x, larg/2}, If[Abs[x] < larg/2, 0., 0.3], -CompiledCode-]

```



In[23]:= **nnt = n.nt**

$$\text{Out[23]} = \left\{ \left\{ \frac{(-x + x2)^2}{(-x1 + x2)^2}, \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2}, \frac{(x - x1)^2}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[24]:= **nxt = Transpose[nx]**

$$\text{Out[24]} = \left\{ \left\{ -\frac{1}{-x1 + x2}, \frac{1}{-x1 + x2} \right\} \right\}$$

In[25]:= **nxnxt = nx.nxt**

$$\text{Out[25]} = \left\{ \left\{ \frac{1}{(-x1 + x2)^2}, -\frac{1}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{(-x1 + x2)^2}, \frac{1}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[26]:= **nxnt = nx.nt**

General::spell : Possible spelling error: new symbol
name "nxnt" is similar to existing symbols {nnt, nxnxt, nxt}.

$$\text{Out[26]} = \left\{ \left\{ -\frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2}, -\frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ \frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2}, \frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[27]:= $\int \mathbf{nnt} \, d\mathbf{x}$

$$\text{Out[27]} = \left\{ \left\{ -\frac{(-x + x2)^3}{3(-x1 + x2)^2}, \frac{-\frac{x^3}{3} - x x1 x2 + \frac{1}{2} x^2 (x1 + x2)}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ \frac{-\frac{x^3}{3} - x x1 x2 + \frac{1}{2} x^2 (x1 + x2)}{(-x1 + x2)^2}, \frac{(x - x1)^3}{3(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[28]:= $(+ \int_e f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 1_e \int_0^1 f(\xi) \, d\xi +)$

In[29]:= **x1 = 0; x2 = 1; x = ξ**

Out[29]= ξ

In[30]:= $1_e + \int_0^1 \mathbf{nnt} \, d\xi$

$$\text{Out[30]} = \left\{ \left\{ \frac{1_e}{3}, \frac{1_e}{6} \right\}, \left\{ \frac{1_e}{6}, \frac{1_e}{3} \right\} \right\}$$

In[31]:= **% / (1_e / 6)**

Out[31]= $\{(2, 1), (1, 2)\}$

In[32]:= $1_e + \int_0^1 \mathbf{nxnxt} \, d\xi$

Out[32]= $\{(1_e, -1_e), (-1_e, 1_e)\}$

In[33]:= **% / (1_e)**

Out[33]= $\{(1, -1), (-1, 1)\}$

$$\text{In}[34]:= \int_0^1 n_{xnt} d\xi$$

$$\text{Out}[34]= \left\{ \left\{ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$$

$$\text{In}[35]:= \% / (1/2)$$

$$\text{Out}[35]= \{ \{-1, -1\}, \{1, 1\} \}$$

$$\text{In}[36]:= (* \text{ Cálculo da matriz de rigidez } *)$$

$$\text{In}[37]:= (* \quad \quad \quad \int_e (\{N_x\} \{N\}^T + U \{N\} \{N\}^T) d\mathbf{x} \quad *)$$

$$\text{In}[38]:= (* \quad \quad \quad \text{Em coordenadas locais} \quad *)$$

$$\text{In}[39]:= (* \quad \quad \quad \int_0^1 \left(l_e (n_{xnt}) + \frac{2 m_{\text{par}}}{f_0^2} U l_e (nnt) \right) d\xi \quad *)$$

$$\text{In}[40]:= (* \quad \quad \quad l_e \Rightarrow \text{comprimento do elemento} \quad *)$$

$$\text{In}[41]:= \text{hbar} = \frac{h}{2\pi}$$

$$\text{Out}[41]= 6.58265 \times 10^{-16}$$

$$\text{In}[42]:= \int_0^1 \left(l_e (n_{xnt}) + \frac{2 m_{\text{par}}}{f_0^2} U l_e (nnt) \right) d\xi$$

$$\text{Out}[42]= \{ \{ 1. l_e + 0.00586179 U l_e, -1. l_e + 0.0029309 U l_e \}, \\ \{ -1. l_e + 0.0029309 U l_e, 1. l_e + 0.00586179 U l_e \} \}$$

$$\text{In}[43]:= l_e = \frac{\text{larg}}{\text{nelem}}$$

$$\text{Out}[43]= \frac{1}{20100000000}$$

$$\text{In}[44]:=$$

$$(* \quad \text{nas extremidades do poço} \quad *)$$

$$\text{In}[45]:= U = U_0$$

$$\text{Out}[45]= 0.3$$

$$\text{In}[46]:= k_b = \int_0^1 \left(l_e (n_{xnt}) + \frac{2 m_{\text{par}}}{f_0^2} U l_e (nnt) \right) d\xi$$

$$\text{Out}[46]= \{ \{ 4.98387 \times 10^{-11}, -4.97075 \times 10^{-11} \}, \{ -4.97075 \times 10^{-11}, 4.98387 \times 10^{-11} \} \}$$

In[47]:=

(* dentro do poço *)

In[48]:= U = 0

Out[48]= 0

In[49]:= $\int \left\{ l_e(nxnxt) + \frac{2 m_{par}}{f_0^2} U l_e(nnt) \right\} d\xi$

Out[49]= $\left\{ \left\{ \frac{\xi}{20100000000}, -\frac{\xi}{20100000000} \right\}, \left\{ -\frac{\xi}{20100000000}, \frac{\xi}{20100000000} \right\} \right\}$

In[50]:= $k_t = \int_0^1 \left\{ l_e(nxnxt) + \frac{2 m_{par}}{f_0^2} U l_e(nnt) \right\} d\xi$

Out[50]= $\left\{ \left\{ \frac{1}{20100000000}, -\frac{1}{20100000000} \right\}, \left\{ -\frac{1}{20100000000}, \frac{1}{20100000000} \right\} \right\}$

In[51]:= K = Table[0, {i, 2 nelem}, {j, 2 nelem}];

listkt = Table[kt[[1, 1]], {i, 2 nelem - 4}];

Do[K[[i, j]] = kb[[i, j]], {i, 1, 2}, {j, 1, 2}];

Do[K[[2 (nelem - 1) + i, 2 nelem - 2 + j]] = kb[[i, j]], {i, 1, 2}, {j, 1, 2}];

Do[K[[i, i]] = kt[[1, 1]], {i, 3, 2 nelem - 2}];

Do[K[[2 i, 2 i - 1]] = kt[[2, 1]], {i, 2, nelem - 1}];

Do[K[[2 i - 1, 2 i]] = kt[[1, 2]], {i, 2, nelem - 1}];

In[58]:= (* **Matrix conexão** *)

mc = Table[0, {2 nelem}, {nelem + 1}];

mc = mc;

Do[mc[[i, i]] = 1, {i, 1, nelem + 1}];

Do[mc[[i, i - nelem]] = 1, {i, nelem + 2, 2 nelem}];

Kcon = Transpose[mc].(K.mc)

(* **Cálculo da matriz de massa** *)

In[64]:= (* $M = \frac{2 m_{par}}{f_0^2} \int_e l_e(n.nt) dx$ *)

In[65]:= (* **Em coordenadas locais** *)

In[66]:= (* **matriz de transformação** *)

In[67]:= $m_{local} = \int_0^1 \frac{2 m_{par}}{f_0^2} l_e(nnt) d\xi$

Out[67]= $\{(2.91631 \times 10^{-13}, 1.45816 \times 10^{-13}), (1.45816 \times 10^{-13}, 2.91631 \times 10^{-13})\}$

In[68]:= listM = Table[mlocal[[1, 1]], {i, 2 nelem}];

M = DiagonalMatrix[listM];

Do[M[[2 i, 2 i - 1]] = mlocal[[1, 2]], {i, 1, nelem}];

Do[M[[2 i - 1, 2 i]] = mlocal[[2, 1]], {i, 1, nelem}];


```
In[72]:= Mcon = Transpose[mc] . (M.mc) ;
Energia = Kcon.Inverse[Mcon] ;
autovalores = Eigenvalues[Energia]
```

```
Out[74]= {682.388, 682.266, 681.891, 681.267, 680.395, 679.277, 677.913, 676.307, 674.462,
672.379, 670.064, 667.519, 664.749, 661.758, 658.552, 655.134, 651.511, 647.688,
643.671, 639.466, 635.079, 630.516, 625.785, 620.892, 615.843, 610.646, 605.307,
599.833, 594.232, 588.511, 582.675, 576.733, 570.692, 564.557, 558.337, 552.037,
545.664, 539.226, 532.727, 526.175, 519.575, 512.934, 506.257, 499.55, 492.819,
486.068, 479.303, 472.529, 465.75, 458.972, 452.198, 445.433, 438.681, 431.946,
425.232, 418.541, 411.878, 405.246, 398.647, 392.085, 385.562, 379.081,
372.644, 366.254, 359.912, 353.62, 347.381, 341.196, 335.066, 328.993, 322.979,
317.024, 311.13, 305.297, 299.527, 293.821, 288.178, 282.6, 277.087, 271.64,
266.26, 260.945, 255.697, 250.516, 245.402, 240.356, 235.376, 230.463, 225.617,
220.838, 216.126, 211.48, 206.9, 202.386, 197.938, 193.556, 189.238, 184.984,
180.795, 176.669, 172.607, 168.607, 164.67, 160.794, 156.98, 153.226, 149.533,
145.899, 142.324, 138.808, 135.35, 131.949, 128.605, 125.317, 122.085, 118.908,
115.785, 112.716, 109.701, 106.738, 103.827, 100.968, 98.1604, 95.4028, 92.6952,
90.0368, 87.4272, 84.8658, 82.3521, 79.8855, 77.4655, 75.0916, 72.7632, 70.4798,
68.2409, 66.0461, 63.8947, 61.7864, 59.7206, 57.697, 55.7149, 53.774, 51.8738,
50.0138, 48.1937, 46.413, 44.6713, 42.9681, 41.3031, 39.6759, 38.0861, 36.5333,
35.0171, 33.5373, 32.0933, 30.6849, 29.3118, 27.9736, 26.6699, 25.4006, 24.1652,
22.9635, 21.7951, 20.6599, 19.5574, 18.4875, 17.4499, 16.4444, 15.4706,
14.5284, 13.6175, 12.7378, 11.8889, 11.0707, 10.283, 9.52558, 8.79827, 8.10088,
7.43326, 6.79524, 6.18665, 5.60736, 5.05722, 4.53609, 4.04385, 3.58038,
3.14556, 2.73929, 2.36147, 2.01201, 1.69081, 1.39781, 1.13293, 0.8961, 0.68727,
0.506383, 0.353396, 0.228265, 0.130948, 0.061377, 0.0192975, 0.00253887}
```

Apêndice B

Rotina no Mathematica para solução do Oscilador Harmônico Simples utilizando MEF.



(* Oscilador Harmônico com solução em uma dimensão
com Elementos lineares *)

```
In[1]:= m_eff = (0.067 + 0.083 y) m_0      (* massa em um elemento de GaAs/Al_x Ga_{1-x} *)
c = 2.998 10^8      (* velocidade da luz em m/s *)
m_0 = 0.511 10^6 / c^2      (* massa de um elétron livre em eV *)
y = 0      (* fator para aproximação da massa específica *)
mefet = m_eff / m_0
h = 4.136 (10^-15)      (* constante de Planck em eV *)
f_0 = 2.76042899      (* fator de normalização em metros (Å) *)
```

```
Out[1]= (0.067 + 0.083 y) m_0
```

```
Out[2]= 2.998 × 10^8
```

```
Out[3]= 5.68536 × 10^-12
```

```
Out[4]= 0
```

```
Out[5]= 0.067
```

```
Out[6]= 4.136 × 10^-15
```

```
Out[7]= 2.76043
```

```
In[8]:= nelem = 1501      (* número de elementos lineares *)
```

```
Out[8]= 1501
```

```
In[9]:= comp = 300 10^-10      (* comprimento em metros (Å ângstrons) *)
```

```
Out[9]=  $\frac{3}{100000000}$ 
```

```
In[10]:= Ux[x_] = x^2  $\frac{\text{const}}{2}$ 
```

```
Out[10]=  $\frac{\text{const } x^2}{2}$ 
```

```
In[11]:= const = 225      (* em eV *)
```

```
Out[11]= 225
```


In[21]:= **MatrixForm**[**g**]

Out[21]//**MatrixForm**=

$$\begin{pmatrix} -\frac{x}{-x1+x2} + \frac{x2}{-x1+x2} \\ \frac{x}{-x1+x2} - \frac{x1}{-x1+x2} \end{pmatrix}$$

In[22]:= **e1** = (**x2** - **x1**)

Out[22]= -x1 + x2

In[23]:= **L1** = $\frac{x2 - x}{e1}$

Out[23]= $\frac{-x + x2}{-x1 + x2}$

In[24]:= $\partial_x L1$

Out[24]= $-\frac{1}{-x1 + x2}$

In[25]:= **L2** = $\frac{x - x1}{e1}$

Out[25]= $\frac{x - x1}{-x1 + x2}$

In[26]:= $\partial_x L2$

Out[26]= $\frac{1}{-x1 + x2}$

In[27]:= **n** = {{**L1**}, {**L2**}}

Out[27]= $\left\{ \left\{ \frac{-x + x2}{-x1 + x2} \right\}, \left\{ \frac{x - x1}{-x1 + x2} \right\} \right\}$

In[28]:= **nx** = {{ $\partial_x L1$ }, { $\partial_x L2$ }}

Out[28]= $\left\{ \left\{ -\frac{1}{-x1 + x2} \right\}, \left\{ \frac{1}{-x1 + x2} \right\} \right\}$

In[29]:= **MatrixForm**[**n**]

Out[29]//**MatrixForm**=

$$\begin{pmatrix} \frac{-x+x2}{-x1+x2} \\ \frac{x-x1}{-x1+x2} \end{pmatrix}$$

In[30]:= **MatrixForm**[**nx**]

Out[30]//**MatrixForm**=

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{-x1+x2} \\ \frac{1}{-x1+x2} \end{pmatrix}$$

In[31]:= nt = Transpose[n]

$$\text{Out[31]} = \left\{ \left\{ \frac{-x + x2}{-x1 + x2}, \frac{x - x1}{-x1 + x2} \right\} \right\}$$

In[32]:= MatrixForm[nt]

$$\text{Out[32]//MatrixForm} = \begin{pmatrix} \frac{-x + x2}{-x1 + x2} & \frac{x - x1}{-x1 + x2} \end{pmatrix}$$

In[33]:= nnt = n.nt

$$\text{Out[33]} = \left\{ \left\{ \frac{(-x + x2)^2}{(-x1 + x2)^2}, \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2}, \frac{(x - x1)^2}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[34]:= MatrixForm[nnt]

$$\text{Out[34]//MatrixForm} = \begin{pmatrix} \frac{(-x + x2)^2}{(-x1 + x2)^2} & \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2} \\ \frac{(x - x1)(-x + x2)}{(-x1 + x2)^2} & \frac{(x - x1)^2}{(-x1 + x2)^2} \end{pmatrix}$$

In[35]:= nxt = Transpose[nx]

$$\text{Out[35]} = \left\{ \left\{ -\frac{1}{-x1 + x2}, \frac{1}{-x1 + x2} \right\} \right\}$$

In[36]:= nxnxt = nx.nxt

$$\text{Out[36]} = \left\{ \left\{ \frac{1}{(-x1 + x2)^2}, -\frac{1}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ -\frac{1}{(-x1 + x2)^2}, \frac{1}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[37]:= MatrixForm[nxnxt]

$$\text{Out[37]//MatrixForm} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(-x1 + x2)^2} & -\frac{1}{(-x1 + x2)^2} \\ -\frac{1}{(-x1 + x2)^2} & \frac{1}{(-x1 + x2)^2} \end{pmatrix}$$

In[38]:= nxnt = nx.nt

$$\text{Out[38]} = \left\{ \left\{ -\frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2}, -\frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \right\}, \left\{ \frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2}, \frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \right\} \right\}$$

In[39]:= MatrixForm[nxnt]

$$\text{Out[39]//MatrixForm} = \begin{pmatrix} -\frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2} & -\frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \\ \frac{-x + x2}{(-x1 + x2)^2} & \frac{x - x1}{(-x1 + x2)^2} \end{pmatrix}$$

$$\text{In[40]:= } \int n n t \, dx$$

$$\text{Out[40]= } \left\{ \left\{ -\frac{(-x+x2)^3}{3(-x1+x2)^2}, \frac{-\frac{x^3}{3} - x x1 x2 + \frac{1}{2} x^2 (x1+x2)}{(-x1+x2)^2} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ \frac{-\frac{x^3}{3} - x x1 x2 + \frac{1}{2} x^2 (x1+x2)}{(-x1+x2)^2}, \frac{(x-x1)^3}{3(-x1+x2)^2} \right\} \right\}$$

$$\text{In[41]:= } (* \quad \int_e f(x) \, dx = l_e \int_0^1 f(\xi) \, d\xi \quad *)$$

$$\text{In[42]:= } x1 = 0$$

$$\text{Out[42]= } 0$$

$$\text{In[43]:= } x2 = 1$$

$$\text{Out[43]= } 1$$

$$\text{In[44]:= } x = \xi$$

$$\text{Out[44]= } \xi$$

$$\text{In[45]:= } l_e * \int_0^1 n n t \, d\xi$$

$$\text{Out[45]= } \left\{ \left\{ \frac{l_e}{3}, \frac{l_e}{6} \right\}, \left\{ \frac{l_e}{6}, \frac{l_e}{3} \right\} \right\}$$

$$\text{In[46]:= } \# / (l_e / 6)$$

$$\text{Out[46]= } \{\{2, 1\}, \{1, 2\}\}$$

$$\text{In[47]:= } l_e * \int_0^1 n x n x t \, d\xi$$

$$\text{Out[47]= } \{\{l_e, -l_e\}, \{-l_e, l_e\}\}$$

$$\text{In[48]:= } \# / (l_e)$$

$$\text{Out[48]= } \{\{1, -1\}, \{-1, 1\}\}$$

$$\text{In[49]:= } \int_0^1 n x n t \, d\xi$$

$$\text{Out[49]= } \left\{ \left\{ -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\}, \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \right\}$$

$$\text{In[50]:= } \text{MatrixForm}[\#]$$

$$\text{Out[50]//MatrixForm=}$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

In[48]:= $\mathbf{8} / (1_e)$

Out[48]= $\{\{1, -1\}, \{-1, 1\}\}$

In[49]:= $\int_0^1 \mathbf{nxnxt} \, d\xi$

Out[49]= $\left\{\left\{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\}, \left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}\right\}$

In[50]:= **MatrixForm**[$\mathbf{8}$]

Out[50]//MatrixForm=

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

In[51]:= $\mathbf{8} / (1/2)$

Out[51]= $\{\{-1, -1\}, \{1, 1\}\}$

In[52]:= (* **Cálculo da matriz de rigidez** *)

In[53]:= (* $\int_{\mathbf{e}} (\{\mathbf{N}_x\} \{\mathbf{N}\}^T + \mathbf{U}_x[\mathbf{x}] \{\mathbf{N}\} \{\mathbf{N}\}^T) \, d\mathbf{x}$ *)

In[54]:= (* **Em coordenadas locais** *)

In[55]:= (* $\int_0^1 \left(1_e (\mathbf{nxnxt}) + \frac{2 \, \text{mefet}}{f_0^2} \mathbf{U}_x[\xi] 1_e (\mathbf{nnt}) \right) d\xi$ *)

In[56]:= (* $1_e \Rightarrow$ comprimento do elemento *)

In[57]:= $\text{hbar} = \frac{h}{2 \pi}$

Out[57]= 6.58265×10^{-16}

In[58]:= $\int_0^1 \left(1_e (\mathbf{nxnxt}) + \frac{2 \, \text{mefet}}{f_0^2} \mathbf{U}_x[\xi] 1_e (\mathbf{nnt}) \right) d\xi$

Out[58]= $\{\{1.06595 1_e, -0.901082 1_e\}, \{-0.901082 1_e, 1.39567 1_e\}\}$

In[59]:= $1_e = \frac{\text{comp}}{\text{nelem}}$

Out[59]= $\frac{3}{10100000000}$

In[60]:= $\mathbf{k}_t = \int_0^1 \left(1_e (\mathbf{nxnxt}) + \frac{2 \, \text{mefet}}{f_0^2} \mathbf{U}_x[\xi] 1_e (\mathbf{nnt}) \right) d\xi$

Out[60]= $\{\{3.16617 \times 10^{-10}, -2.67648 \times 10^{-10}\}, \{-2.67648 \times 10^{-10}, 4.14556 \times 10^{-10}\}\}$

```

In[61]:= K = Table[0, {i, 2 nelem}, {j, 2 nelem}];
listkt = Table[kt[[1, 1]], {i, 2 nelem - 4}];
Do[K[[i, j]] = kt[[i, j]], {i, 1, 2}, {j, 1, 2}];
Do[K[[2 (nelem - 1) + i, 2 nelem - 2 + j]] = kt[[i, j]], {i, 1, 2}, {j, 1, 2}];
Do[K[[i, i]] = kt[[1, 1]], {i, 3, 2 nelem - 2}];
Do[K[[2 i, 2 i - 1]] = kt[[2, 1]], {i, 2, nelem - 1}];
Do[K[[2 i - 1, 2 i]] = kt[[1, 2]], {i, 2, nelem - 1}];

In[68]:= (*          Matrix conexão          *)

In[69]:= mc = Table[0, {2 nelem}, {nelem + 1}];
mc = mc;
Do[mc[[i, i]] = 1, {i, 1, nelem + 1}];
Do[mc[[i, i - nelem]] = 1, {i, nelem + 2, 2 nelem}];

In[73]:= Kcon = Transpose[mc] . (K.mc);
(*          Cálculo da matriz de massa          *)

In[74]:= (*           $M = \frac{2 m_{efet}}{f_0^2} \int_e l_e (n.nt) dx$           *)

In[75]:= (*          Em coordenadas locais          *)

In[76]:= (*          matriz de transformação          *)

In[77]:= mlocal =  $\int_0^1 \frac{2 m_{efet}}{f_0^2} l_e (nnt) d\xi$ 

Out[77]= {{1.74113 × 10-12, 8.70563 × 10-13}, {8.70563 × 10-13, 1.74113 × 10-12}}

In[78]:= listM = Table[mlocal[[1, 1]], {i, 2 nelem}];
M = DiagonalMatrix[listM];
Do[M[[2 i, 2 i - 1]] = mlocal[[1, 2]], {i, 1, nelem}];
Do[M[[2 i - 1, 2 i]] = mlocal[[2, 1]], {i, 1, nelem}];

In[82]:= Mcon = Transpose[mc] . (M.mc);
Energia = Kcon.Inverse[Mcon];
autovalores = Eigenvalues[Energia]

```

Apêndice C

Rotina em MATLAB para a determinação dos autoestados em um poço de potencial utilizando EFGM.

```
% PROGRAMA PARA SIMULAÇÃO DO EFGM EM
%          UMA DIMENSÃO
% RESOLUÇÃO DA EQ. DE SCHRODINGER EM POÇO DE POTENCIAL
%
%1ºPASSO
% CONFIGURAÇÃO DAS COORDENADAS NODAIS AO LONGO DA LARGURA
% DO POÇO E DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE CÉLULAS.
% larg é a largura total do dominio
% dbar é a largura do poço de potencial
dbar=200.0;
larg=400.0 + dbar;
% delx é a largura de cada divisão entre dois nós
% nnodes é o número de nós para a simulação
% ncells é o número de células
delx=10.0;
x = [0.0:delx:larg];
nnodes = length(x);
ncells = nnodes-1;
% 2ºPASSO
```




```

% CONFIGURAÇÃO DOS PARÂMETROS PARA FUNÇÃO PESO,
% E PROPRIEDADES DO MATERIAL
% Valor de DMI para CI
dmax = 2.0;
% E=1.0;area=1.0;
% constantes para o problema da barreira de potencial
meff1=0.0919;
meff2=0.067;
xol=2.76042899;
plank1=(xol^2)/(2*meff1);
plank2=(xol^2)/(2*meff2);
% Determinação do valor DM para cada nó
dm = dmax*(x(2)-x(1))*ones(1,nnodes);
% Configuração dos pontos de Gauss, pesos e jacobianopara cada célula
gg = zeros(1,ncells);
jac = (x(2)-x(1))/2;
weight = 2;
gg = -delx/2:delx:larg-delx/2; gg(1) = 0.0;
% 3ºPASSO
% Montagem das Matrizes
k = zeros(nnodes);
t = zeros(nnodes);
f = zeros(nnodes,1);
GG = zeros(nnodes,2);
phic = zeros(nnodes,nnodes);
dphic = zeros(nnodes,nnodes);
conta = 0;
numstd=zeros(1,11);
% Iteração sobre os pontos de Gauss
for j = 1:length(gg)
    xg = gg(j);

```



```

% Determinação da distância entre os pontos de Gauss
dif = xg*ones(1,nnodes)-x;;

% 4ºPASSO

% Configuração das funções peso W e DW para cada nó
clear w dw
for i=1:nnodes
    drdx = sign(dif(i))/dm(i);
    r = abs(dif(i))/dm(i);
    if r<=0.5
        w(i) = (2/3) - 4*r*r + 4*r^3;
        dw(i) = (-8*r + 12*r^2)*drdx;
    elseif r<=1.0
        w(i) = (4/3)-4*r+4*r*r -(4/3)*r^3;
        dw(i) = (-4 + 8*r-4*r^2)*drdx;
    elseif r>1.0
        w(i) = 0.0;
        dw(i) = 0.0;
    end
end

% Configuração das funções de forma e suas derivadas
won = ones(1,nnodes);
p = [won;x];
B = p.*[w;w];
pp = zeros(2);
A = zeros(2);
dA = zeros(2);
for i=1:nnodes
    pp = p(1:2,i)*p(1:2,i)';
    A = A+w(1,i)*pp;
    dA = dA+dw(1,i)*pp;
end

```



```

Ainv = inv(A);
pg = [1 xg];
phi = pg*Ainv*B;
% armazena em phic as funcoes phi de i em cada xg,
% calcular os autoestados
phic(j,1:nnodes)=phi(1,1:nnodes);
db = p.*[dw;dw];
da = -Ainv*(dA*Ainv);
dphi = [0 1]*Ainv*B+pg*(da*B+Ainv*db);
dphic(j,1:nnodes)=dphi(1,1:nnodes);
% 5ºPASSO
% Montagem das Equações Discretas
if j == 1
% Introdução das condições de contorno
GG(1:3,1) = phi(1:3)';
else if j == nnodes
GG(nnodes-2:nnodes,2)=phi(nnodes-2:nnodes)';
else if (j>1) & (j<=nnodes-1)
xg1=xg;
if xg1 <= 200
VO=0.225;
plank = plank1;
elseif (xg1 > 200) & (xg1 < 200+dbar)
VO=0.0;
plank = plank2;
elseif xg1 >= 200+dbar
VO=0.225;
plank = plank1;
end
% confere os potenciais no poco
% VO

```




```

% matriz para o laplaciano e o potencial
    k = k + (weight*plank*jac)*(dphi'*dphi) + VO*(weight*jac)*(phi'*phi);
% matriz metrica
    t = t + (weight*jac)*(phi'*phi);
end
end
end
end
% Imposição das condições de contorno usando os multiplicadores de Lagrange
% q=[0];
% cálculo dos autovalores e autovetores
m = [k GG;GG' zeros(2,2)];
tt = [t zeros(nnodes,2); zeros(nnodes,2)' zeros(2,2)];
% resultado com os multiplicadores de Lagrange
[u1,v1]=eig(m,tt);
% resultado sem os multiplicadores de Lagrange
[u2,v2]=eig(k,t);
% exemplo: calcula o auto estado que corresponde aos coeficientes da coluna
% da matriz u1 acima. As variaveis dpar retêm as derivadas dos autoestados,
% e são usadas no cálculo dos autovalores.
% imprime todos os autovalores
for kd = 1:nnodes
    estd=phic*u1(1:nnodes,kd);
    dpar=dphic*u1(1:nnodes,kd);
% 6ºPASSO
%COMEÇO DO CALCULO DOS AUTOVALORES
%primeiramente a integral de gradiente escalar gradiente
    smtd=0; smtd2=0;smtd3=0;smtd4=0;
    for j = 1:length(gg)
        xg1 = gg(j);
        if xg1 <= 200

```



```

    plank = plank1;
elseif (xg1 > 200) & (xg1 < 200+dbar)
    plank = plank2;
elseif xg1 >= 200+dbar
    plank = plank1;
end
smtld= smtd + (weight*plank*jac)*(dpar(j)*dpar(j));
end

% agora, a integral do termo com o potencial
spot=0; spot2=0; spot3=0; spot4=0;
for j = 1:length(gg)
    xg1=gg(j);
    if xg1 <= 200
        VO=0.225;
    elseif (xg1 > 200) & (xg1 < 200+dbar)
        VO=0.0;
    elseif xg1 >= 200+dbar
        VO=0.225;
    end
    spot = spot + VO*(weight*jac)*(estd(j)*estd(j));
end

% e, por fim, a integral que multiplica o autovalor desejado
metr=0; metr2=0; metr3=0;metr4=0;
for j = 1:length(gg)
    metr = metr + (weight*jac)*(estd(j)*estd(j));
end

% O CÁLCULO DOS AUTOVALORES
eigv = (smtld + spot)/metr;
if eigv <= 0.225
    conta = conta + 1;
    numstd(conta) = kd;

```



```
kd, 1000*eigv
end
end
nnodes
% RESULTADO GRÁFICO PARA estd
subplot (2,2,1)
plot(gg,phic*u1(1:nnodes,numstd(1)))
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot(2,2,2)
plot(gg,phic*u1(1:nnodes,numstd(2)))
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot(2,2,3)
plot(gg,phic*u1(1:nnodes,numstd(3)),)
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot(2,2,4)
plot(gg,phic*u1(1:nnodes,numstd(4)))
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
```



Apêndice D

Rotina em MATLAB para solução do Oscilador Harmônico Simples utilizando EFGM.

```
% PROGRAMA PARA SIMULAÇÃO DO EFGM EM UMA DIMENSÃO
%
% RESOLUÇÃO DA EQ. DE SCHRÖDINGER - OSCILADOR HARMÔNICO
%
%1ºPASSO
% CONFIGURAÇÃO DAS COORDENADAS NODAIS AO LONGO DO COMPRIMENTO
% E DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE CÉLULAS.
% comp é o comprimento total do dominio
comp=400.0;
% delx é a largura de cada divisão entre dois nós
% nnos é o número de nós para a simulação
% ncelulas é o número de células
delx=0.5;
x = [-comp/2:delx:comp/2];
nnos = length(x);
ncelulas = nnos-1;
% 2ºPASSO
% CONFIGURAÇÃO DOS PARÂMETROS PARA FUNÇÃO PESO,
% E PROPRIEDADES DO MATERIAL
% Valor de DMI para CI
```



```

dmax = 2.0;

% constantes para o problema do oscilador harmônico
meff=0.0665;
xol=2.76042899;
plank=(xol^2)/(2*meff);

% Determinação do valor DM para cada nó
dm = dmax*(x(2)-x(1))*ones(1,nnos);

% Configuração dos pontos de Gauss, jacobiano e peso para cada célula
gg = zeros(1,ncelulas);
jac = (x(2)-x(1))/2;
peso = 2;
gg = (-delx/2)-(comp/2):delx:(comp/2)-delx/2;

% 3ºPASSO

% MONTAGEM DAS MATRIZES
k = zeros(nnos);
t = zeros(nnos);
f = zeros(nnos,1);
GG = zeros(nnos,2);
phic = zeros(nnos,nnos);
dphic = zeros(nnos,nnos);
conta = 0;
numstd=zeros(1,11);

% Iteração sobre os pontos de Gauss
for j = 1:length(gg)
    xg = gg(j);

% Determinação da distância entre os pontos de Gauss
    dif = xg*ones(1,nnos)-x;

% Configuração das funções peso W e DW para cada nó
    clear w dw
    for i=1:nnos
        drdx = sign(dif(i))/dm(i);

```



```

r = abs(dif(i))/dm(i);
if r<=0.5
    w(i) = (2/3) - 4*r*r + 4*r^3;
    dw(i) = (-8*r + 12*r^2)*drdx;
elseif r<=1.0
    w(i) = (4/3)-4*r+4*r*r -(4/3)*r^3;
    dw(i) = (-4 + 8*r-4*r^2)*drdx;
elseif r>1.0
    w(i) = 0.0;
    dw(i) = 0.0;
end
end
% Configuração das funções de forma e suas derivadas
won = ones(1,nnos);
p = [won;x];
B = p.*[w;w];
pp = zeros(2);
A = zeros(2);
dA = zeros(2);
for i=1:nnos
    pp = p(1:2,i)*p(1:2,i)';
    A = A+w(1,i)*pp;
    dA = dA+dw(1,i)*pp;
end
Ainv = inv(A);
pg = [1 xg];
phi = pg*Ainv*B;
% armazena em phic as funcoes phi de i em cada xg,
% calcular os autoestados
phic(j,1:nnos)=phi(1,1:nnos);
db = p.*[dw;dw];

```




```

da = -Ainv*(dA*Ainv);
dphi = [0 1]*Ainv*B+pg*(da*B+Ainv*db);
dphic(j,1:nnos)=dphi(1,1:nnos);
% MONTAGEM DAS EQUAÇÕES DISCRETAS
if j == 1
% Introdução das condições de contorno
GG(1:3,1) = phi(1:3)';
else if j == nnos
GG(nnos-2:nnos,2)=phi(nnos-2:nnos)';
else if (j>=1) & (j<=nnos)
xg1=xg;
% valor da constante
cte=0.225;
% valor do potencial
V=(xg1^2)*cte/2;
% matriz para o laplaciano e o potencial
k = k + (peso*plank*jac)*(dphi'*dphi) + V*(peso*jac)*(phi'*phi);
% matriz metrica
t = t + (peso*jac)*(phi'*phi);
end
end
end
end
% cálculo dos autovalores e autovetores
% resultado sem os multiplicadores de Lagrange
[u2,v2]=eig(k,t);
%as variaveis dpar retêm as derivadas dos autoestados,
%e são usadas no cálculo dos autovalores.
%imprime todos os autovalores
for kd = 1:nnos
estd=phic*u2(1:nnos,kd);

```



```

    dpar=dphic*u2(1:nos,kd);
%COMEÇO DO CALCULO DOS AUTOVALORES
%primeiramente a integral de gradiente escalar gradiente
    smtd=0;
    for j = 1:length(gg)
        xg1 = gg(j);
        plank=plank;
        smtd= smtd + (peso*plank*jac)*(dpar(j)*dpar(j));
    end
% agora, a integral do termo com o potencial
    spot=0;
    for j = 1:length(gg)
        xg1=gg(j);
        V=(xg1^2)*cte/2;
        spot = spot + V*(peso*jac)*(estd(j)*estd(j));
    end
% e, por fim, a integral que multiplica o autovalor desejado
    metr=0;
    for j = 1:length(gg)
        metr = metr + (peso*jac)*(estd(j)*estd(j));
    end
% O CÁLCULO DOS AUTOVALORES
    eigv = (smtd + spot)/metr;
    if eigv <= 50
        conta = conta + 1;
        numstd(conta) = kd;
        kd, 1000*eigv
    end
end
nos
% RESULTADO GRÁFICO PARA estd

```



```
subplot (2,2,1)
plot(gg,phic*u2(1:nnos,numstd(1)), 'k')
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot (2,2,2)
plot(gg,phic*u2(1:nnos,numstd(2)), 'k')
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot (2,2,3)
plot(gg,phic*u2(1:nnos,numstd(3)), 'k')
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot (2,2,4)
plot(gg,phic*u2(1:nnos,numstd(4)), 'k')
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
subplot (2,2,5)
plot(gg,phic*u2(1:nnos,numstd(5)), 'k')
xlabel ( 'x (Angstroms)')
ylabel ( 'phi (eV)')
```



