

Método Crank-Nicolson $(2 + 1)$ Para Busca de Soluções Para a Equação de Wheeler-DeWitt

Hamilton J. Brumatto¹, Germano A. Monerat¹

¹Instituto Politécnico do Rio de Janeiro

hjbrumatto@iprj.uerj.br, monerat@iprj.uerj.br

Abstract. *In this work we use the Crank-Nicolson scheme $(2+1)$ of finite differences method for the quantization of the Friedmann-Robertson-Walker (FRW) models with positive curvature ($k = 1$), and a scalar field conformally coupled to the gravitation and a fluid of radiation. These models does not have numerical solutions. In the approach we created a generic template library to solve similar problems.*

Resumo. *Neste trabalho fazemos o uso do método de diferenças finitas no esquema Crank-nicolson $(2+1)$ para a quantização dos modelos de Friedmann-Robertson-Walker (FRW) com curvatura positiva ($k = 1$), campo escalar conformalmente acoplado à gravitação e um fluido de radiação. Tais modelos ainda não possuem soluções numéricas. Na abordagem criamos uma biblioteca modelo genérica para solução de problemas semelhantes.*

1. INTRODUÇÃO

O trabalho de deWitt[DeWitt 1967] pode ser considerado o ponto de partida para o estudo dos efeitos quânticos no Universo primordial, a chamada cosmologia quântica. A Teoria da Relatividade Geral (TRG) prevê a existência de uma singularidade, o *big bang*. Desde então, a descrição coerente da era de Planck se tornou um desafio. Para a descrição desta fase é comum a introdução de um campo escalar como conteúdo material. Dessa forma, muitos pesquisadores têm investigado modelos cosmológicos com fluidos e campos escalares ([Alvarenga and Fabris 1995]; [Alvarenga and Fabris 1996]; [Dodelson and Schmidt 2020]).

Para descrição da dinâmica na era de Planck os efeitos quânticos devem ser considerados. Uma das formas de introduzir esses efeitos em modelos cosmológicos com fluidos e campos escalares, consiste na quantização em minisuperespaço através da combinação do formalismo de Dirac ([Halliwell 2009]), e do formalismo de Schutz para fluidos relativísticos ([Schutz 1971]). Algumas soluções analíticas já foram obtidas ([Lemos and Alvarenga 1999], [Lemos et al. 2003]). A introdução de um termo de massa no potencial do campo escalar conduz à quebra da integrabilidade analítica. Este trabalho busca aplicar solução numérica para a equação de Wheeler DeWitt usando o esquema Crank-Nicolson em $(2+1)$ ([van Dijk et al. 2017]).

2. O MODELO

Neste trabalho vamos considerar um modelo homogêneo e isotrópico, descrito pela geometria de Friedmann-Robertson-Walker (FRW) com curvatura positiva na seção espacial

e como conteúdo material vamos considerar um fluido perfeito na forma de radiação e um campo escalar conformalmente acoplado à gravitação massivo com massa m e uma constante cosmológica (Λ) que fará o papel de vácuo do campo de inflação.

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

em que p_a , p_φ e p_T são respectivamente os momentos canonicamente conjugados a: variável do fator de escala a , do campo escalar φ e da coordenada do fluido de radiação T . Aqui o potencial efetivo $V_{ef}(a, \varphi)$ assume a forma:

$$V_{ef}(a, \varphi) = 3a^2 - \frac{1}{2}\varphi^2 - \Lambda a^4 - \frac{m^2}{2}a^2\varphi^2 \quad (2)$$

O processo de quantização seguirá a proposta de Dirac, na qual os momentos serão elevados ao grau de operadores diferenciais,

$$p_a \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial a}, \quad p_\varphi \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad p_T \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial T}. \quad (3)$$

Além disso faremos o uso do vínculo hamiltoniano $\mathcal{H} = 0$ que conduz a

$$\mathcal{H}\Psi(a, \varphi, T) = 0, \quad (4)$$

em que $\Psi(a, \varphi, T)$ trata-se da função de onda do Universo. Levando Eqs. (3) e (4) em Eq. (1) encontramos:

$$-\frac{1}{12}\frac{\partial^2\Psi(a, \varphi, \tau)}{\partial a^2} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi(a, \varphi, \tau)}{\partial \varphi^2} + V_{ef}(a, \varphi)\Psi(a, \varphi, \tau) - i\frac{\partial\Psi(a, \varphi, \tau)}{\partial \tau} = 0, \quad (5)$$

em que reparametrizamos $T = -\tau$. O fator de escala a está restrito ao domínio $a > 0$, tal que a quantização em minisuperespaço é efetuada no semi-eixo $(0, \infty)$, e o campo escalar não possui restrição, as condições de contorno e inicial são:

$$\Psi(0, \varphi, \tau) = 0, \quad \Psi(\infty, \varphi, \tau) = 0, \quad \Psi(a, -\infty, \tau) = 0, \quad \Psi(a, \infty, \tau) = 0. \quad (6)$$

$$\Psi(a, \varphi) = \frac{2^{15/4}}{\sqrt{\pi}} E_a^{3/4} E_\varphi^{1/4} a \exp(-4E_a a^2 - 2E_\varphi \varphi^2) \quad (7)$$

3. SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica segue a mesma abordagem para soluções de Equações Diferenciais Parciais (EDP) como problema de valor inicial. A Eq. (5) pode ser apresentada como:

$$\left(\hat{H} - i\frac{\partial}{\partial \tau} \right) \Psi(a, \varphi, \tau) = 0 \quad (8)$$

A solução prevê evolução em τ e integração em a e φ . Para a evolução em τ temos a abordagem de Crank e Nicolson generalizada com o operador de evolução exponencial descrito por um aproximante de Padé [1/1], [van Dijk et al. 2017].

3.1. Evolução em τ

Para a Eq. (8) uma solução em τ , usando diferenças finitas é representada como:

$$\begin{aligned}\Psi(\tau + \Delta\tau) &= e^{-i\Delta\tau\hat{H}}\Psi(\tau) \rightarrow e^{-i\Delta\tau\hat{H}} = \frac{1 - i\Delta\tau\hat{H}/2}{1 + i\Delta\tau\hat{H}/2} + O(\Delta\tau^3) \\ \frac{\Psi(t + \Delta\tau) - \Psi(t)}{\Delta\tau} &= -\frac{i}{2}\hat{H} [\Psi(t + \Delta\tau) + \Psi(t)]\end{aligned}\quad (9)$$

3.2. Integração em a e φ

Para o segundo termo precisamos da integração numérica em a e φ . Isto pode ser facilmente obtido a partir da expansão de $f(x + \Delta x)$ em série de Taylor:

$$f''(x) = \frac{1}{\Delta x^2} (f(x - \Delta x) - 2f(x) + f(x + \Delta x)) + O(\Delta x^4) \quad (10)$$

Vamos trabalhar com a notação $\Psi_{i,j}^n = \Psi(a_0 + i\Delta a, \varphi_{-\infty} + j\Delta\varphi, \tau_0 + n\Delta\tau)$. O nosso infinito numérico, ou seja é um valor grande o suficiente que seja de referência para as condições de contorno. Assim, i, j e n variam respectivamente de 0 a N_a, N_φ e N_τ .

$$\begin{aligned}\Psi_{i,j}^{n+1} - \Psi_{i,j}^n &= -\frac{i\Delta\tau}{2} \left[-\frac{1}{12\Delta a^2} (\Psi_{i-1,j}^{n+1} - 2\Psi_{i,j}^{n+1} + \Psi_{i+1,j}^{n+1}) + \right. \\ &\quad \frac{1}{2\Delta\varphi^2} (\Psi_{i,j-1}^{n+1} - 2\Psi_{i,j}^{n+1} + \Psi_{i,j+1}^{n+1}) + V_{i,j}\Psi_{i,j}^{n+1} + \\ &\quad \left. -\frac{1}{12\Delta a^2} (\Psi_{i-1,j}^n - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i+1,j}^n) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2\Delta\varphi^2} (\Psi_{i,j-1}^{n+1} - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i,j+1}^{n+1}) + V_{i,j}\Psi_{i,j}^n \right]\end{aligned}\quad (11)$$

Vamos reescrever os termos Ψ^{n+1} em função de Ψ^n , com as seguintes constantes:

$$r_a = \frac{i\Delta\tau}{24(\Delta a)^2}, \text{ e } r_\varphi = -\frac{i\Delta\tau}{4(\Delta\varphi)^2} \quad (12)$$

$$\begin{aligned}m_{ij} &= \left(1 + 2r_a + 2r_\varphi + i\frac{\Delta\tau}{2}V_{i,j} \right), \text{ e} \\ b_{ij} &= \left(1 - 2r_a - 2r_\varphi - i\frac{\Delta\tau}{2}V_{i,j} \right)\end{aligned}\quad (13)$$

Assim, Ψ^{n+1} fica apenas como função de Ψ^n , como temos o valor inicial: $\Psi_{i,j}^0 = \Psi(a, \varphi, 0)$, obtemos a solução do modelo ao realizar a evolução em τ :

$$\begin{aligned}m_{ij}\Psi_{i,j}^{n+1} - r_a\Psi_{i+1,j}^{n+1} - r_a\Psi_{i-1,j}^{n+1} - r_\varphi\Psi_{i,j+1}^{n+1} - r_\varphi\Psi_{i,j-1}^{n+1} = \\ b_{ij}\Psi_{i,j}^n + r_a\Psi_{i+1,j}^n + r_a\Psi_{i-1,j}^n + r_\varphi\Psi_{i,j+1}^n + r_\varphi\Psi_{i,j-1}^n\end{aligned}\quad (14)$$

3.3. O sistema de equações

A Eq. (14) pode ser reescrita em termos de um sistema linear de equações:

$$\mathbf{M}\Psi^{n+1} = \mathbf{B}\Psi^n \quad (15)$$

O vetor Ψ segue a ordem: $\Psi = \{\Psi_{00}, \Psi_{10}, \dots, \Psi_{N_a,0}, \Psi_{01}, \Psi_{11}, \dots, \Psi_{N_a N_\varphi}\}$.

O segundo termo é $\mathbf{B}\Psi^n$, neste caso, \mathbf{B} é semelhante a \mathbf{M} , se trocar $-r_a$ por r_a , $-r_\varphi$ por r_φ e m_{ij} por b_{ij} , segundo vimos nas Eqs. (12), (13) e (14).

Na solução do sistema linear, usamos um método iterativo convergente, como o de Gradientes Conjugados ([Hestenes and Stiefel 1952]). Ao aplicar o método, precisamos levar em conta a precisão que desejamos em Ψ com o erro das aproximações em a , φ e τ , para podermos dimensionar corretamente os valores de N_a , N_φ e N_τ .

3.4. Implementação

Para a implementação precisamos definir nossos parâmetros e nosso infinito numérico, condição necessária para as condições de contorno previstas na Eq. (6). Pegamos $m = 0.001$ e $\Lambda = 10^{-3}$. $E_a = 5$ e $E_\varphi = 3$. Considerando o máximo da barreira potencial com um valor de 2250 unidades de energia, e a função de onda do universo com uma energia cinética de 2 unidades de energia ($E_a - E_\varphi$). Para tanto precisamos estabelecer o nosso *infinitésimo* baseado nos erros de aproximação que consideramos aceitáveis. Para o Potencial efetivo, Eq. (2), e para Ψ^0 podemos pensar como infinito $a = 80$ e $|\varphi| = 80$.

Vamos considerar que após a barreira de potencial, a função de onda que atravessa e *dê origem ao Universo* seja uma fração da função de onda original, Eq. (7). Esta fração pode ser algumas ordens de grandezas menor que o valor inicial. Assumimos, então, para obter algum resultado satisfatório, que o erro de aproximação para a função de onda Ψ seja da ordem de 10^{-8} . Este valor nos dá o erro previsto para $\Delta t : O(\Delta t^3)$, ou seja precisamos $\Delta t 10^{-3}$. Também para $\Delta a : O(\Delta a^4)$ e $\Delta \varphi : O(\Delta \varphi^4)$, neste caso, precisamos $\Delta a 10^{-2}$ e $\Delta \varphi 10^{-2}$, vamos tomar inicialmente $N_a = 4000$ e $N_\varphi = 4000$.

Definidos os valores numéricos para a nossa simulação, resta-nos executar o algoritmo e resolver o sistema linear. Mas é importante observar que o vetor Ψ (todos os pontos da função de onda) possui dimensão $N_a \times N_\varphi$ que é de 16.000.000 pontos. A matriz \mathbf{M} e \mathbf{B} , são matrizes esparsas, uma linha tem no máximo 5 elementos não nulos: dois valores de r_a , dois valores de r_φ e um valor m_{ij} ou b_{ij} , assim, se utilizarmos um algoritmo baseado em matrizes esparsas teremos uma alocação no espaço $\mathcal{P}(N_a \times N_\varphi)$.

Na implementação numérica precisamos de uma solução $O(N)$. Neste aspecto vamos trabalhar com um sistema que trabalha com matrizes esparsas, em especial criaremos uma biblioteca modelo genérica para que possa ser usada no futuro em diversas classes de problemas, e que realize a solução em um ambiente paralelizado com múltiplos núcleos. A escolha do algoritmo de Gradientes Conjugados para a solução do sistema linear foi baseada no fato de que ele converge a uma solução em poucas iterações. Isto traz um complicador no paralelismo pois toda solução iterativa é sequencial. Mesmo assim dentro de uma iteração, e considerando o volume de dados, ainda é possível paralelizar o processo de uma iteração. Assim a solução para a evolução em um valor de $\Delta \tau$, que é a solução do sistema linear é $O(N_a \times N_\varphi)$. Precisamos então de $N_\tau O(N_a \times N_\varphi)$ iterações para atingir o valor de τ final desejado. Se $\tau = 1$ $N_\tau = 2000$, com $N_a \times N_\varphi \approx 10^7$.

Criando-se uma biblioteca modelo genérica para a solução computacional, esta biblioteca é um resultado principal deste trabalho e pode ser utilizada em outros problemas semelhantes, que seria a solução computacional de um modelo de crank-nicolson aplicado a uma EDP de segunda ordem (1+1) e (2+1). Além disto há como resultado a solução para este modelo em especial, solução esta inédita.

4. RESULTADOS

Aplicamos a solução computacional em um HPC de alto desempenho com várias dezenas de threads, mesmo assim, uma solução completa do modelo, a depender dos parâmetros, toma vários dias de simulação. O primeiro resultado importante que obtemos é que:

$\int_{a_0}^{a_\infty} \int_{\varphi_{-\infty}}^{\varphi_\infty} \Psi^* \Psi da d\varphi = 1$. Ou seja como Ψ representa a distribuição da probabilidade de existência do universo, a soma da probabilidade em toda a extensão é 1, para qualquer valor de τ . Isto pode ser visto na figura 1.

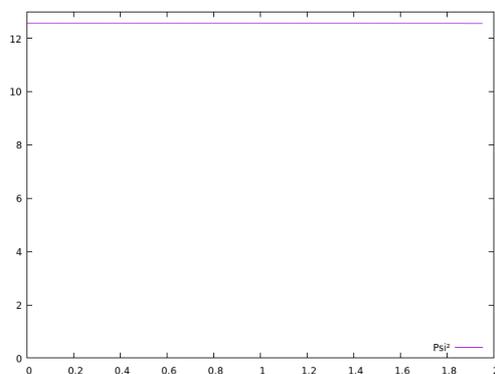


Figura 1. Integridade da evolução da função de onda.

Outro resultado importante é que não há mais a singularidade do *big bang* pois a nunca atinge o valor 0, vide figura 2. Nos primeiros instantes da evolução em τ a função de onda não foi capaz de atravessar a barreira de potencial.

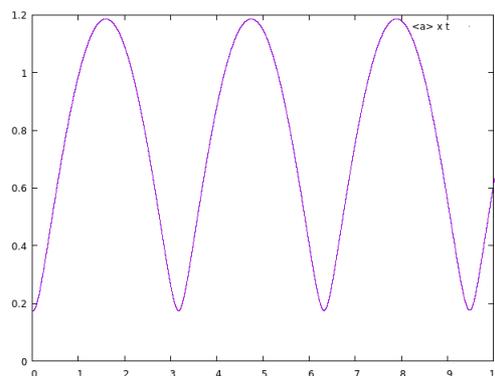


Figura 2. Evolução do valor médio do fator de escala a em relação a τ

5. CONCLUSÃO

O método aplicado permitiu a quantização do modelo, obtendo soluções de norma finita e definidas em todo espaço, até mesmo quando o fator de escala vai a zero, indicando a

ausência de qualquer singularidade no modelo a nível quântico. Podemos nos aprofundar neste método estendendo o valor final de τ e mesmo simulando novos valores tanto para m quanto Λ quanto para os valores das energias E_a e E_φ . Um possível objetivo é identificar se os resultados podem alimentar o que é esperado após a Era de Planck, ou seja uma parte da função de onda atravessar a barreira de potencial e surgir o universo. No aspecto computacional, o método apesar de gerar estes resultados preliminares ainda precisa de um refinamento, tanto em questões de convergência nos processos iterativos, tanto em relação à otimização o tempo de processamento. Mas sendo este um trabalho inicial, estes aspectos vêm sendo trabalhado. Sua aplicabilidade potencial está na solução dos modelos de Wheeler-DeWitt em vários aspectos da cosmologia quântica, gerando resultados inéditos.

Referências

- Alvarenga, F. G. and Fabris, J. C. (1995). Primordial cosmology with a contraction phase. *Classical and Quantum Gravity*, 12(8):L69.
- Alvarenga, F. G. and Fabris, J. C. (1996). A primordial cosmological scenario and the horizon problem. *General Relativity and Gravitation*, 28(6):645–662.
- DeWitt, B. S. (1967). Quantum Theory of Gravity. I. The Canonical Theory. *Physical Review*, 160(5):1113–1148. Publisher: American Physical Society.
- Dodelson, S. and Schmidt, F. (2020). *Modern Cosmology*. Academic Press, London, United Kingdom ; San Diego, CA, 2nd ed. edição edition.
- Halliwell, J. J. (2009). Introductory Lectures on Quantum Cosmology (1990). arXiv:0909.2566 [gr-qc].
- Hestenes, M. R. and Stiefel, E. (1952). Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(6):2379.
- Lemos, N. A. and Alvarenga, F. G. (1999). Wormholes, Classical Limit and Dynamical Vacuum in Quantum Cosmology. *General Relativity and Gravitation*, (31):1743.
- Lemos, N. A., Monerat, G. A., Oliveira, H. P. d., Soares, I. D., and Tonini, E. V. (2003). Role of quantum cosmology in the chaotic dynamics of inflation. *Phys. Rev. D*, (68):083516.
- Schutz, B. F. (1971). Hamiltonian Theory of a Relativistic Perfect Fluid. *Phys. Rev. D*, (4):3559.
- van Dijk, W., Vanderwoerd, T., and Prins, S.-J. (2017). Numerical solutions of the time-dependent Schrodinger equation in two dimensions. *Physical Review E*, 95(2):023310. arXiv:1701.08137 [physics].

6. AGRADECIMENTOS

H. J. Brumatto agradece à Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC/BA) pelo apoio financeiro no desenvolvimento da pesquisa, resultado do convênio PCI com o IPRJ/UERJ. G. A. Monerat agradece à FAPERJ pelo apoio financeiro parcial, e à Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ/RJ) pela bolsa de Prociência.