



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Computação
Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada

Resolução da Equação de Schrödinger independente do tempo via Redes Neurais

José Nascimento dos Santos

Dissertação de Mestrado
Recife-PE
Fevereiro de 2026

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Estatística e Informática
Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada

José Nascimento dos Santos

Resolução da Equação de Schrödinger independente do tempo via Redes Neurais

Dissertação de mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada do Departamento de Estatística e Informática da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Informática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Tiago Alessandro Espínola Ferreira

Dissertação de Mestrado
Recife-PE
Fevereiro de 2026

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE
Bibliotecário(a): Auxiliadora Cunha – CRB-4 1134

S237r Santos, José Nascimento dos.
Resolução da Equação de Schrödinger independente do tempo via Redes Neurais / José Nascimento dos Santos. – Recife, 2026.
57 f.; il.

Orientador(a): Tiago Alessandro Espínola Ferreira.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada, Recife, BR-PE, 2026.

Inclui referências.

1. Redes neurais (Computação). 2. Equações diferenciais. 3. Sistemas quânticos. 4. Pytorch 5. Neurodiffeq. I. Ferreira, Tiago Alessandro Espínola, orient. II. Título

CDD 004

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Estatística e Informática
Programa de Pós-Graduação em Informática Aplicada

José Nascimento dos Santos

Resolução da Equação de Schrödinger independente do tempo via Redes Neurais

Dissertação de mestrado julgada adequada para
obtenção do título de mestre em Informática Apli-
cada a aprovada por unanimidade em 26 de Feve-
reiro de 2026 pela comissão examinadora.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Tiago Alessandro Espínola Ferreira
Orientador - DEINFO/UFRPE

Profa. Dra. Kerolly Kedma Felix do Nascimento
Examinadora Externa

Prof. Dr. Antônio de Pádua Santos
Examinador Externo

Agradecimentos

Gostaria de expressar minha sincera gratidão a todos aqueles que tornaram possível a realização desta dissertação. Primeiramente, agradeço à minha família. À minha mãe, Maria Luzinete, e ao meu pai, Reginaldo Graciliado, que sempre me motivaram a buscar o conhecimento por meio dos livros, dos professores e da educação. Recordo com carinho que, quando dispunham de tempo em meio às jornadas de trabalho, faziam questão de me levar e buscar diariamente na escola, localizada a quilômetros de nossa casa, ainda na minha infância. Esse esforço foi fundamental para a minha formação pessoal e acadêmica.

Agradeço também às minhas irmãs, Raquel Maria e Aline Maria, e ao meu querido sobrinho, Thaysson Davi, pelo apoio incondicional ao longo de todo o mestrado, especialmente nos momentos mais desafiadores, nos quais o incentivo e a presença de vocês foram essenciais para que eu seguisse em frente.

Expresso minha gratidão aos amigos que me escutaram, apoiaram e me motivaram a continuar meus estudos em meio a tantas adversidades. Em especial, sou profundamente grato a Davi Duarte, meu fiel amigo, que esteve presente tanto nos momentos bons quanto nos difíceis, sempre me ouvindo, apoiando e buscando soluções ao meu lado; a Bruna Lícia, que em diversos momentos passamos horas em ligação me ouvindo, apoiando e motivando; a Paulo Rafael, pela presença constante em minha vida, sempre vibrando, apoiando e me confortando em momentos difíceis; e a Sthefany Oliveira, que esteve comigo como uma amiga que me mostrou que é possível vencer quaisquer circunstâncias quando se tem fé além de escutar momentos em eu tinha uma ideia absurda da computação e física.

Por fim, agradeço aos meus queridos professores, que sigo tendo como referência até hoje. Em especial, a Antônio Carlos Miranda, meu “sensei”, que me ensinou que o conhecimento não deve ser apenas acumulado, mas compartilhado, inclusive no cotidiano e para além dos limites da nossa área; a Ailton Júnior, por me mostrar que sou capaz de vencer barreiras intelectuais e ser aquilo que almejo; e ao meu estimado orientador, Tiago Alessandro, pela paciência, pelos ensinamentos, por me ajudar a superar limites e, em muitos momentos, por também se mostrar um amigo.

Resumo

Métodos numéricos têm como objetivo a obtenção de aproximações para a solução de equações em situações nas quais métodos analíticos se mostram inviáveis, em geral devido à elevada complexidade matemática dos problemas considerados. Nesse contexto, abordagens baseadas em redes neurais artificiais têm se consolidado como alternativas promissoras para a resolução de equações diferenciais, sobretudo em cenários de alta dimensionalidade ou com forte não linearidade. As Redes Neurais Informadas por Física (*Physics-Informed Neural Networks* – PINNs) constituem uma classe de métodos computacionais nos quais a formulação do problema físico é incorporada diretamente à função de custo da rede neural, por meio das equações diferenciais governantes e de suas condições iniciais e de contorno. Essa estratégia permite que o processo de treinamento seja orientado não apenas por dados, mas também por princípios físicos bem estabelecidos, possibilitando à rede capturar, de forma consistente, tanto as características globais quanto os comportamentos locais associados à dinâmica do sistema em estudo. Sob essa perspectiva, o presente trabalho tem como objetivo investigar o uso de Redes Neurais Informadas por Física como ferramenta computacional para a solução de equações diferenciais em sistemas quânticos independentes do tempo. Busca-se avaliar, de maneira sistemática, a robustez numérica, a estabilidade do processo de treinamento e a capacidade de generalização dessas redes frente a diferentes configurações do problema. A análise é conduzida por meio da implementação e comparação de dois frameworks amplamente utilizados na literatura, PyTorch e NeurodiffEq, permitindo discutir não apenas os resultados físicos obtidos, mas também aspectos computacionais relacionados à eficiência, flexibilidade e reprodutibilidade das soluções.

Palavras-Chave: Redes Neurais; Equações Diferenciais; Sistemas Quânticos; Pytorch; NeurodiffEq

Abstract

Numerical methods aim to obtain approximate solutions to equations in situations where analytical approaches become unfeasible, generally due to the high mathematical complexity of the problems under consideration. In this context, approaches based on artificial neural networks have emerged as promising alternatives for the solution of differential equations, particularly in high-dimensional settings or in the presence of strong nonlinearities. Physics-Informed Neural Networks (PINNs) constitute a class of computational methods in which the formulation of the physical problem is directly incorporated into the neural network loss function through the governing differential equations and their associated initial and boundary conditions. This strategy allows the training process to be guided not only by data, but also by well-established physical principles, enabling the network to consistently capture both global features and local behaviors associated with the dynamics of the system under study. From this perspective, the present work aims to investigate the use of Physics-Informed Neural Networks as a computational tool for solving differential equations in time-independent quantum systems. The study seeks to systematically evaluate the numerical robustness, training stability, and generalization capability of these networks under different problem configurations. The analysis is carried out through the implementation and comparison of two frameworks widely adopted in the literature, PyTorch and Neurodiffeq, allowing for a discussion not only of the physical results obtained, but also of computational aspects related to efficiency, flexibility, and reproducibility of the solutions.

Keywords: Neural Networks; Differential Equations; Quantum Systems; PyTorch; Neurodiffeq

Lista de Figuras

	Página
2.1 Domínio bidimensional Ω com condição de contorno do tipo Dirichlet, na qual o valor da solução é prescrito em toda a fronteira $\partial\Omega$, destacada em azul.	19
2.2 Interpretação geométrica da condição de contorno de Neumann: as linhas de nível de $u(x)$ são ortogonais ao gradiente ∇u , que por sua vez está alinhado com o vetor normal η à fronteira.	20
2.3 Função de onda no potencial degrau com $E < V_0$. O potencial degrau encontra-se em $x > 0$.	25
2.4 Primeiros modos oscilantes (funções de onda) no poço de potencial infinito em função do número quântico n .	26
2.5 Efeito de tunelamento quântico em uma região não permitida classicamente ($E < V(x)$).	27
2.6 Sistema de barreira dupla de potencial para valores de $V_1, V_2, E, m, \hbar, a, b, c$ e suas respectivas constantes multiplicativas vistas na Equação (2.25). A função de onda apresenta decaimento nas barreiras e um comportamento oscilatório na cavidade central ($a < x < b$).	28
2.7 Potencial e primeiras funções de onda do oscilador harmônico quântico.	29
3.1 Esquema geral de uma Rede Neural Informada por Física (simplificada), indicando as camadas de entrada, ocultas e de saída, as ativações internas $a_i^{(l)}$, a aproximação da solução $\psi(x)$ e a construção da função de perda física.	32
4.1 Simulação utilizando a arquitetura em PyTorch.	39
4.2 Simulação utilizando a biblioteca NeuroDiffEq.	40
4.3 Resultados da simulação via PyTorch utilizando decomposição de domínio (três redes).	42
4.4 Resultados da simulação via NeuroDiffEq utilizando rede única.	43
4.5 Densidade de probabilidade $\psi^2(x)$ e curvas de perda para o Poço Potencial via PyTorch ($n = 1$ e $n = 6$).	45
4.6 Resultados obtidos via NeuroDiffEq evidenciando a instabilidade em estados excitados ($n = 6$).	46

4.7	Resultados da PINN PyTorch para o estado $n = 1$: (a) Função de onda, (b) Convergência da Loss, (c) Extrapolação e (d) Erro pontual.	48
4.8	Resultados da PINN Neurodiffee para o estado $n = 1$: (a) Função de onda, (b) Convergência da Loss, (c) Extrapolação e (d) Erro pontual.	49
4.9	Resultados para Barreira Dupla via PyTorch: (a) Sobreposição analítica vs predita, (b) Curvas de Loss e MSE, (c) Teste de extrapolação e (d) Erro absoluto local.	50
4.10	Resultados para Barreira Dupla via PyTorch: (a) Sobreposição analítica vs predita, (b) Curvas de Loss e MSE, (c) Teste de extrapolação e (d) Erro absoluto local.	51

Lista de Tabelas

	Página
2.1 Exemplos de equações diferenciais e identificação do termo independente .	17
4.1 Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq.	38
4.2 Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Potencial de Barreira.	41
4.3 Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Poço Potencial.	44
4.4 Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Oscilador Harmônico.	47
4.5 Comparativo de hiperparâmetros para o sistema de Barreira Dupla.	50

[title=Lista de Símbolos]

Sumário

	Página
1 Introdução	12
1.1 Objetivos	13
1.1.1 Objetivo Geral	13
1.1.2 Objetivos Específicos	14
1.2 Estrutura do Documento	14
2 Fundamentação metodológica matemática e física	15
2.1 Equações diferenciais na formulação de problemas	15
2.1.1 Equações diferenciais e notação	16
2.1.2 Problemas de valor inicial e problema de contorno	17
2.1.3 Contornos de Dirichlet e Neumann	18
2.2 Formulação de Schrödinger da mecânica quântica	20
2.2.1 Equação de onda, Medidas probabilísticas da mecânica quântica e valores esperados	21
2.2.2 Equação de Schrödinger em potenciais específicos	23
2.2.3 Sistemas quânticos utilizados	24
3 Fundamentação metodológica computacional	31
3.1 Redes Neurais Informadas por Física	31
3.1.1 Formulação Geral das PINNs	32
3.1.2 Redes Neurais de Schrödinger	34
3.2 Arquitetura das redes neurais via Frameworks	34
4 Resultados e Discussões	38
4.1 Sistemas Independentes do Tempo	38
4.1.1 Potencial Degrau ($V > E$)	38
4.1.2 Potencial Barreira ($V > E$)	41
4.1.3 Poço de Potencial Infinito	44
4.1.4 Oscilador Harmônico Quântico	47
4.1.5 Barreira de Potencial Dupla	49
5 Conclusões e Perspectivas	53

Capítulo 1

Introdução

A resolução numérica de equações diferenciais constitui um dos problemas centrais da computação científica, estando presente em aplicações que vão desde a modelagem de sistemas físicos e biológicos até a simulação de processos industriais e tecnológicos. Em muitos desses contextos, as equações governantes são não lineares, de alta ordem ou definidas em domínios complexos, o que torna a obtenção de soluções analíticas inviável e impõe desafios significativos do ponto de vista computacional (Reddy, 1993). Tradicionalmente, tais problemas são tratados por métodos numéricos clássicos, como diferenças finitas, elementos finitos e métodos espectrais. Embora amplamente consolidados, esses métodos dependem fortemente da discretização explícita do domínio, do refinamento de malhas e de estratégias específicas para a imposição de condições de contorno, o que pode resultar em elevado custo computacional, dificuldades de implementação e limitações na generalização das soluções (Taneja, 2008) (Gould; Tobochnik; Christian, 1988).

Nos últimos anos, avanços em aprendizado de máquina e redes neurais artificiais têm impulsionado o desenvolvimento de novas abordagens computacionais para a resolução de problemas governados por equações diferenciais. Em particular, a combinação de redes neurais profundas com técnicas de diferenciação automática permitiu o surgimento de métodos capazes de aproximar soluções contínuas e diferenciáveis sem a necessidade de malhas explícitas. Nesse contexto, destacam-se as Redes Neurais Informadas por Física (Physics-Informed Neural Networks, abreviado como PINNs), que incorporam diretamente as equações diferenciais e as condições físicas do problema na função de custo utilizada durante o treinamento (Lagaris; Likas; Fotiadis, 1998) .

Do ponto de vista computacional, as PINNs representam uma mudança de paradigma: em vez de resolver a equação diferencial por meio de esquemas discretos locais, o problema é reformulado como um processo de otimização global no espaço de funções, no qual a rede neural atua como um aproximador universal. Essa característica torna o método particularmente atrativo para problemas multidisciplinares, nos quais o conhecimento prévio do sistema pode ser incorporado como restrição, reduzindo a dependência de grandes volumes de dados rotulados. Entretanto, apesar do crescente interesse pelas

PINNs, diversos desafios computacionais permanecem em aberto, especialmente no que se refere à estabilidade numérica, à convergência do treinamento, à escolha de arquiteturas adequadas e à capacidade de generalização das redes (Krishnapriyan *et al.*, 2021) (Wang; Teng; Perdikaris, 2021). Tais questões tornam-se ainda mais evidentes em problemas governados por equações diferenciais de natureza espectral, nos quais a solução apresenta comportamentos oscilatórios, regiões de decaimento e forte dependência das condições de contorno.

Neste contexto, esta dissertação propõe uma investigação computacional do uso de Redes Neurais Informadas por Física para a resolução da equação de Schrödinger independente do tempo. Embora a equação de Schrödinger seja oriunda da mecânica quântica, ela é utilizada neste trabalho como um conjunto de problemas de benchmark, permitindo avaliar de forma controlada o desempenho das PINNs em sistemas descritos por equações diferenciais com soluções analíticas conhecidas. O foco principal da pesquisa estende-se na análise física dos sistemas quânticos em si e na avaliação crítica das PINNs como método computacional. São analisados aspectos como convergência, estabilidade, extrapolação e sensibilidade a escolhas arquiteturais e estratégias de treinamento do ponto de vista computacional, e do ponto de vista físico, o efeito de tunelamento quântico, densidade de probabilidade e respeito as mudanças de potenciais. Para isso, são consideradas duas abordagens de implementação: uma baseada diretamente no framework PyTorch e outra utilizando a biblioteca NeuroDiffEq, possibilitando comparar níveis distintos de abstração e controle computacional.

Dessa forma, este trabalho situa-se na interseção entre computação científica, aprendizado de máquina física aplicada e matemática, explorando como técnicas modernas de redes neurais podem ser empregadas como ferramentas computacionais gerais para a solução de equações diferenciais governadas por leis físicas.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

O presente trabalho tem como objetivo investigar o uso de Redes Neurais Informadas por Física (PINNs) como ferramenta computacional para a solução da equação de Schrödinger independente do tempo. Busca-se avaliar, de maneira sistemática, a robustez numérica, a estabilidade do processo de treinamento e a capacidade de generalização dessas redes frente a diferentes configurações do problema. A análise é conduzida por meio da implementação e comparação de duas abordagens distintas. Na primeira, utilizando o framework PyTorch, adota-se uma estratégia de partição do domínio espacial em subdomínios, associando-se uma rede neural a cada partição. Essa abordagem permite investigar os efeitos da decomposição do domínio na estabilidade do treinamento, na propagação

de erros e na qualidade da aproximação global da solução. Na segunda, empregando o framework Neurodiffeq, considera-se o domínio completo modelado por uma única rede neural, possibilitando uma análise comparativa entre a abordagem monolítica e a abordagem particionada.

Dessa forma, pretende-se discutir não apenas os resultados físicos obtidos, mas também aspectos computacionais relacionados à eficiência, convergência, flexibilidade estrutural e reprodutibilidade das soluções.

1.1.2 Objetivos Específicos

1. Analisar a formulação matemática da equação de Schrödinger independente do tempo e suas soluções analíticas para sistemas quânticos selecionados.
2. Investigar métodos analíticos de resolução de equações diferenciais, estabelecendo critérios de comparação com abordagens baseadas em aprendizado de máquina.
3. Implementar Redes Neurais Artificiais para a aproximação de soluções de equações diferenciais, avaliando diferentes arquiteturas e estratégias de treinamento.
4. Formular e implementar Redes Neurais Informadas por Física (PINNs), incorporando as restrições físicas diretamente na função de perda.
5. Desenvolver e comparar duas estratégias computacionais distintas: (i) uma abordagem com partição de domínio utilizando múltiplas redes no framework PyTorch; (ii) uma abordagem monolítica com rede única utilizando o framework Neurodiffeq.
6. Avaliar o desempenho numérico das abordagens propostas em termos de estabilidade, convergência, erro médio quadrático (MSE) e erro relativo em norma L2.

1.2 Estrutura do Documento

A organização da dissertação é a seguinte: o Capítulo 2 apresenta a fundamentação física necessária para a formulação dos problemas considerados; o Capítulo 3 discute os aspectos computacionais das Redes Neurais Informadas por Física e as arquiteturas empregadas; o Capítulo 4 apresenta e analisa os resultados obtidos; e o Capítulo 5 apresenta as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Fundamentação metodológica matemática e física

2.1 Equações diferenciais na formulação de problemas

Equações diferenciais possuem um papel importante na ciência, uma vez que, por meio dessas equações, é possível explicar fenômenos, analisar aspectos específicos que podem passar despercebidos em uma ótica global, bem como avaliar e prever eventos futuros analisando a sua evolução. Um dos aspectos mais vantajosos, especialmente para a Física e a Matemática, é a capacidade de modelar fenômenos por meio dessas equações. Nesse sentido, Boyce e DiPrima destacam que “Muitos dos princípios, ou leis, que regem o comportamento do mundo físico são proposições, ou relações, envolvendo a taxa segundo a qual as coisas acontecem. Expressas em linguagem matemática, as relações são equações e as taxas são derivadas. Equações contendo derivadas são equações diferenciais. Portanto, para compreender e investigar problemas envolvendo variações de alguma grandeza física precisamos saber o básico sobre equações diferenciais.

Com a evolução da ciência e do poder computacional, diversos métodos e aplicações baseados em equações diferenciais foram desenvolvidos (Press, 2007). Um dos campos em que essas equações obtiveram grande êxito está associado ao avanço das técnicas numéricas e computacionais, em especial à diferenciação automática. Essa abordagem permite o cálculo eficiente e preciso de derivadas, desempenhando um papel fundamental no treinamento de redes neurais artificiais. Como consequência, a diferenciação automática tornou-se um dos pilares dos modelos modernos de inteligência artificial, sendo amplamente utilizada em arquiteturas de aprendizado profundo e em sistemas baseados em redes neurais, incluindo modelos de linguagem e outras aplicações contemporâneas de IA (Baydin *et al.*, 2018).

Contudo, assim como qualquer método ou formulação descritiva da natureza, essas abordagens apresentam limitações. Nesse contexto, a obtenção de soluções analíticas

de equações diferenciais, utilizadas para descrever o comportamento do sistema, pode se tornar uma tarefa exaustiva ou, frequentemente, inviável. Um exemplo clássico é o problema dos três corpos na mecânica celeste, para o qual não existe uma solução analítica geral. De forma semelhante, equações diferenciais não lineares e acopladas, como as equações de Navier–Stokes que governam a dinâmica dos fluidos, não admitem solução geral conhecida. Essas limitações também se manifestam em aplicações cotidianas, como na previsão do tempo, cuja modelagem envolve sistemas altamente sensíveis às condições iniciais, restringindo a previsibilidade e exigindo o uso de métodos numéricos e computacionais (Anderson, 2002).

Lidar com problemas dessa natureza motivou o desenvolvimento de métodos auxiliares capazes de fornecer soluções aproximadas para equações diferenciais, conhecidos como métodos numéricos. Entre essas abordagens, destacam-se métodos clássicos, como os esquemas de Runge–Kutta e técnicas baseadas em amostragem estocástica, como o método de Monte Carlo, bem como abordagens mais recentes que utilizam redes neurais artificiais, as quais atuam como aproximadores universais de funções (Bengio; Goodfellow; Courville *et al.*, 2017). Dessa forma, torna-se necessário compreender os aspectos gerais das equações diferenciais, bem como suas principais classificações e condições associadas, a fim de aplicá-las na modelagem e resolução de problemas de interesse científico e tecnológico.

2.1.1 Equações diferenciais e notação

Uma equação diferencial é uma equação matemática que relaciona uma função desconhecida com uma ou mais de suas derivadas em relação a uma ou mais variáveis independentes. De forma geral, uma equação diferencial pode ser expressa como a ação de um operador diferencial sobre uma função desconhecida, isto é,

$$\mathcal{D}(y(\vec{x})) = F(\vec{x}, y(\vec{x}), \nabla y(\vec{x}), \nabla^2 y(\vec{x}), \dots, \nabla^k y(\vec{x})) \quad (2.1)$$

onde $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \Gamma \subset \mathbb{R}^n$ representa o vetor de variáveis independentes definido em um domínio Γ , $y(\vec{x})$ é a função desconhecida, e $\nabla^k y$ denota as derivadas de ordem k . A ordem de uma equação diferencial é definida pela maior ordem de derivada presente na equação, enquanto o número de variáveis independentes determina se a equação é classificada como ordinária (EDO) ou parcial (EDP). Equações diferenciais ordinárias envolvem derivadas em relação a uma única variável independente, enquanto equações diferenciais parciais envolvem derivadas em relação a duas ou mais variáveis independentes.

Além disso, equações diferenciais podem ser classificadas como homogêneas ou não homogêneas como vista (tabela 2.1), dependendo da ausência ou presença de termos independentes, frequentemente associados a fontes, forças ou excitações externas. O termo independente é aquele que não multiplica a função desconhecida nem suas derivadas.

Tabela 2.1: Exemplos de equações diferenciais e identificação do termo independente

Equação	Tipo	Ordem	Homogeneidade	Termo independente
$\frac{d\psi(x)}{dx} + a\psi(x) = 0$	EDO	1 ^a	Homogênea	–
$\frac{d\psi(x)}{dx} + a\psi(x) = f(x)$	EDO	1 ^a	Não homogênea	$f(x)$
$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$	EDP	2 ^a	Homogênea	–
$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + g(x,t)$	EDP	2 ^a	Não homogênea	$g(x,t)$

Além das classificações apresentadas, equações diferenciais também podem ser classificadas quanto à sua linearidade. Uma equação diferencial é dita linear quando a função desconhecida e suas derivadas aparecem apenas de forma linear, não envolvendo produtos, potências ou funções não lineares da solução. Caso contrário, a equação é classificada como não linear. Essa distinção é particularmente relevante, uma vez que muitos sistemas físicos de interesse são descritos por equações diferenciais não lineares, para as quais, em geral, não existem soluções analíticas fechadas, como

$$\frac{dy(t)}{dt} = r y(t) \left(1 - \frac{y(t)}{K} \right), \quad (2.2)$$

é uma equação diferencial não linear, conhecida como equação logística, amplamente empregada na modelagem de crescimento populacional com limitação de recursos.

Para resolver uma equação diferencial, é necessário especificar condições adicionais que caracterizam o estado do sistema no início da sua evolução ou nas fronteiras do domínio considerado. Isso ocorre porque equações diferenciais, por si só, admitem um conjunto infinito de soluções possíveis, sendo a solução física ou de interesse determinada apenas após a imposição de condições iniciais e/ou condições de contorno.

As condições iniciais especificam o valor da função desconhecida e, quando necessário, de suas derivadas em um ponto inicial do domínio, caracterizando os chamados problemas de valor inicial (Boyce; DiPrima; Meade, 2017). Por outro lado, as condições de contorno impõem restrições à solução nas fronteiras do domínio, dando origem aos problemas de valor de contorno. Esses conceitos serão detalhados na seção seguinte.

2.1.2 Problemas de valor inicial e problema de contorno

A solução de uma equação diferencial, em geral, não é única, sendo caracterizada por uma família de soluções parametrizada por constantes ou funções arbitrárias, refletindo os graus de liberdade do sistema. Essa não unicidade decorre da ausência de informações adicionais que especifiquem completamente o estado físico do problema. A imposição de condições iniciais ou de contorno permite restringir essa família, selecionando uma solução fisicamente admissível. Sob hipóteses adequadas de regularidade, o Teorema de Existência

e Unicidade, como o teorema de Picard–Lindelöf para equações diferenciais ordinárias, garante que um problema de valor inicial admite uma única solução em um intervalo suficientemente próximo do ponto inicial (Boyce; DiPrima; Meade, 2017). Em casos particulares, como em equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, a família de soluções pode ser expressa explicitamente por meio de constantes arbitrárias, evidenciando a necessidade de condições adicionais para garantir a unicidade. Como exemplo, considere a equação diferencial ordinária

$$\frac{dy(t)}{dt} = a y(t), \quad (2.3)$$

cujas soluções gerais são

$$y(t) = C e^{at}, \quad (2.4)$$

onde C é uma constante arbitrária. A imposição de uma condição inicial, como $y(t_0) = y_0$, determina unicamente o valor de C , selecionando uma única solução dentro da família admissível.

Entretanto, nem todos os sistemas físicos são adequadamente descritos por problemas de valor inicial. Em muitos casos, o sistema não apresenta uma evolução temporal privilegiada ou encontra-se em regime estacionário, sendo governado por restrições impostas nas fronteiras do domínio. Nessas situações, a formulação natural do problema ocorre por meio de problemas de valor de contorno, nos quais a solução é determinada a partir de condições prescritas nas extremidades do domínio espacial (Strauss, 2007) e que respeitem a física do problema.

Problemas de valor de contorno surgem de forma recorrente em fenômenos como a condução de calor em regime estacionário, a determinação de potenciais eletrostáticos e a descrição de estados ligados em sistemas quânticos, como o poço potencial, nos quais as condições físicas impõem restrições espaciais à solução. Como utilizaremos os contornos de Neumann e Dirichlet no próximo capítulo, cabe nessa dissertação uma breve explanação.

2.1.3 Contornos de Dirichlet e Neumann

As condições de contorno especificam o comportamento da solução de uma equação diferencial nas fronteiras do domínio de interesse, sendo fundamentais para a determinação de soluções fisicamente admissíveis em problemas de valor de contorno. Seja $u(x)$ uma função definida em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, com fronteira $\partial\Omega$. Uma condição de contorno do tipo Dirichlet consiste na prescrição direta do valor da função na fronteira do domínio, sendo expressa por

$$u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (2.5)$$

onde $g(x)$ é uma função conhecida definida sobre a fronteira. Esse tipo de condição é comum em sistemas físicos nos quais o estado da variável de interesse é fixado nas extremidades do domínio. Um exemplo clássico é o problema da propagação de ondas em

uma corda fixa nas extremidades, como em uma corda de violão. Nesse caso, assumindo uma corda de comprimento L , as extremidades são mantidas fixas, resultando nas condições de contorno

$$u(0, t) = u(L, t) = 0, \quad (2.6)$$

as quais caracterizam condições de Dirichlet homogêneas. Por outro lado, condições de contorno do tipo Neumann especificam o valor da derivada normal da solução na fronteira do domínio, sendo geralmente associadas a fluxos, gradientes ou taxas de variação. Matematicamente, são dadas por

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x) = h(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (2.7)$$

onde $\partial u/\partial n$ denota a derivada normal à fronteira e $h(x)$ é uma função prescrita. Condições de Neumann surgem, por exemplo, em problemas de condução de calor quando se impõe um fluxo térmico conhecido através da fronteira, ou em sistemas isolados, nos quais o fluxo normal é nulo (Strauss, 2007). Em domínios multidimensionais, como regiões bidimensionais ou tridimensionais, as condições de contorno são impostas ao longo de toda a fronteira do domínio, que pode assumir diferentes geometrias, como regiões retangulares, domínios circulares ou volumes mais gerais. A escolha adequada do tipo de condição de contorno depende diretamente da natureza física do problema modelado.

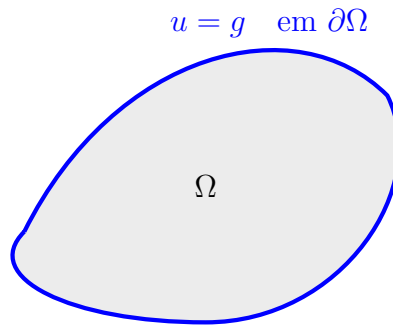


Figura 2.1: Domínio bidimensional Ω com condição de contorno do tipo Dirichlet, na qual o valor da solução é prescrito em toda a fronteira $\partial\Omega$, destacada em azul.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

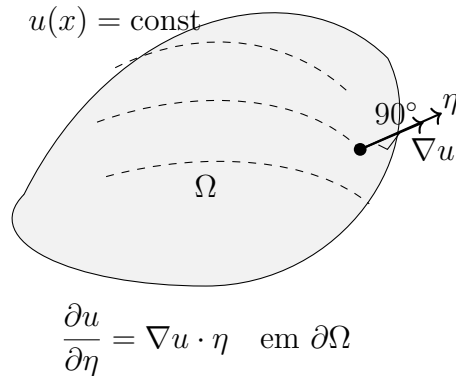


Figura 2.2: Interpretação geométrica da condição de contorno de Neumann: as linhas de nível de $u(x)$ são ortogonais ao gradiente ∇u , que por sua vez está alinhado com o vetor normal η à fronteira.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

2.2 Formulação de Schrödinger da mecânica quântica

A mecânica quântica é uma das teorias da física mais divulgadas atualmente fora da comunidade científica. Os principais temas abordados referem-se, em geral, a fenômenos como a dualidade onda-partícula, o tunelamento quântico e o emaranhamento quântico, que muitas vezes são apresentados de forma equivocada, sendo associados a interpretações “místicas” ou “espirituais”. Essa visão distorcida surge, em grande parte, da tentativa de interpretar conceitos rigorosamente matemáticos e probabilísticos à luz do senso comum, o que não reflete a natureza formal e objetiva da teoria.

Do ponto de vista científico, a mecânica quântica constitui uma estrutura teórica bem definida, baseada em postulados claros e verificada experimentalmente com elevado grau de precisão. Seu desenvolvimento foi motivado pela incapacidade da física clássica de descrever adequadamente fenômenos microscópicos, como a radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico e os espectros atômicos. A partir dessas limitações, tornou-se evidente a necessidade de uma nova formulação teórica capaz de descrever o comportamento da matéria e da radiação em escalas atômicas e subatômicas (Eisberg; Resnick, 1986).

Atualmente, o campo de aplicação da mecânica quântica não se limita apenas à comunidade científica, estendendo-se a diversas áreas do setor tecnológico, industrial, financeiro e social (Nielsen; Chuang, 2010). Em comum, essas aplicações exploram a capacidade da teoria em descrever sistemas cujos resultados não são determinísticos, mas estatísticos por natureza. Nesse sentido, compreender como a mecânica quântica relaciona seu formalismo matemático com quantidades físicas observáveis torna-se fundamental, uma vez que todas as previsões da teoria estão associadas a probabilidades e valores médios obtidos a partir de processos de medida.

2.2.1 Equação de onda, Medidas probabilísticas da mecânica quântica e valores esperados

Na física clássica, os sistemas físicos são descritos a partir de suas dimensões macroscópicas, e as interações entre os corpos são adequadamente modeladas pelas leis da Mecânica Newtoniana. No entanto, quando se consideram escalas microscópicas, da ordem de átomos e partículas subatômicas, diversos efeitos observados experimentalmente não podem ser explicados por esse formalismo. Nessas escalas, fenômenos como a quantização de energia e a interferência tornam-se relevantes, evidenciando as limitações da descrição clássica.

Um dos fenômenos centrais que motivaram o desenvolvimento da mecânica quântica é a dualidade onda-partícula, segundo a qual entidades microscópicas exibem simultaneamente características corpusculares e ondulatórias. Essa dualidade é formalmente incorporada por meio da função de onda $\Psi(x, t)$, que contém toda a informação acessível sobre o estado físico do sistema. Essa função é a solução da equação de onda, que representa como o sistema evolui no tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (2.8)$$

Uma equação diferencial parcial de segunda ordem e homogênea. A resolução dessa equação baseia-se na exploração de suas propriedades matemáticas e físicas fundamentais. Em particular, para potenciais independentes do tempo, a equação admite soluções separáveis, permitindo desacoplar a dependência espacial e temporal da função de onda. Essa abordagem conduz a uma equação diferencial ordinária para a parte espacial, cuja solução depende diretamente da forma do potencial $V(x)$, e a uma evolução temporal harmônica associada à energia do sistema. As condições de contorno e os requisitos de normalização impõem restrições adicionais às soluções admissíveis, resultando, em muitos casos, na quantização dos níveis de energia.

O aspecto importante e físico de notarmos é que $\hbar = h/2\pi$ a constante de Planck reduzida, que define a escala em que os efeitos quânticos aparecem, $V(x)$ o potencial em que a partícula está submetida. Além disso, diferentemente do que ocorre na física clássica, o ato de medir uma grandeza associada a um sistema quântico interfere no estado do sistema, alterando sua evolução subsequente, princípio conhecido como Princípio da Incerteza de Heisenberg (aqui abordamos o caso unidimensional mas vale para as outras dimensões) que nos diz

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2 \quad (2.9)$$

em que Δp_x é a incerteza do momento no eixo x , Δx é a incerteza da posição. Essa equação nos diz que não podemos determinar com precisão a posição e o momento no

mesmo instante da matéria ou onda e independente das melhorias dos equipamentos esse produto deve ser maior que $\hbar/2$ (Eisberg; Resnick, 1986). Como consequência, os resultados de medidas não podem ser previstos de forma determinística, sendo descritos em termos de distribuições de probabilidade. Dessa forma, torna-se necessário introduzir uma interpretação estatística da função de onda, visto que essa equação além de ser complexa, diz mais à respeito da formulação matemática de como essa equação deve ser para que a sua solução descreva bem os fenômenos físicos, do que realmente representar a evolução de onda física real no tempo. Portanto, o que conecta às propriedades da função de onda $\Psi(x, t)$ ao comportamento da partícula associada é a densidade de probabilidade $P(x, t)$. Essa grandeza nos diz qual é a probabilidade de encontrar uma partícula no intervalo $(x, x + \delta x)$, por unidade de comprimento ao longo desse eixo, no instante t . De acordo com o postulado de Born, a relação entre $P(x, t)$ e $\Psi(x, t)$ é

$$P(x, t) = \Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (2.10)$$

o símbolo $\Psi(x, t)^*$ representa o complexo conjugado de $\Psi(x, t)$ e pode ser interpretado como a amplitude da função de onda.

A partir da interpretação probabilística da função de onda, torna-se possível definir quantitativamente grandezas físicas observáveis. Em mecânica quântica, cada observável está associado a um operador linear hermitiano, que atua sobre a função de onda do sistema. O resultado de uma medida individual corresponde a um dos autovalores desse operador; no entanto, devido ao caráter probabilístico da teoria, o que pode ser previsto de forma determinística é o valor médio obtido após um grande número de medições realizadas em sistemas preparados no mesmo estado quântico.

Esse valor médio é denominado *valor esperado* do observável e fornece a ligação entre o formalismo matemático da mecânica quântica e os resultados experimentais. Para uma grandeza física A , associada ao operador $\hat{A}$, o valor esperado no estado descrito pela função de onda $\Psi(x, t)$ é definido por

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx. \quad (2.11)$$

No caso particular da posição, cujo operador associado é simplesmente $\hat{x} = x$, o valor esperado assume a forma

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx, \quad (2.12)$$

o que evidencia sua interpretação como a média estatística da posição da partícula, ponderada pela densidade de probabilidade.

De maneira análoga, o operador momento no eixo x é dado por

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.13)$$

de modo que o valor esperado do momento pode ser escrito como

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) dx. \quad (2.14)$$

Essas expressões mostram que, embora a mecânica quântica não permita a determinação simultânea e precisa de certas grandezas físicas, como posição e momento, ela fornece previsões estatísticas bem definidas para os valores médios dessas quantidades. Dessa forma, os valores esperados desempenham papel central na descrição física dos sistemas quânticos, sendo diretamente comparáveis a resultados experimentais (Cohen-Tannoudji; Diu; Laloë, 2019).

2.2.2 Equação de Schrödinger em potenciais específicos

A natureza fundamental da equação de Schrödinger (2.28) reside na sua capacidade de descrever a dinâmica da função de onda sob a influência de diferentes potenciais $V(x)$ de sistemas de partículas ou partículas individuais que possuem uma determinada energia E . Dessa forma, diferentes sistemas físicos são descritos por diferentes potenciais. As seções seguintes apresentam um conjunto de sistemas que foram utilizados como estudos de caso nesta pesquisa, considerando o caso unidimensional, no qual a equação de Schrödinger assume a forma independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.15)$$

A partir de manipulações algébricas padrão, que podem ser encontradas em (Griffiths; Schroeter, 2018), essa equação pode ser reescrita para regiões onde o potencial é constante sob forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (2.16)$$

Nessa expressão, k representa o número de onda associado à partícula estando diretamente relacionado à energia total E e ao potencial $V(x)$ do sistema. Para cada perfil de potencial considerado neste trabalho, define-se um valor específico de k , o que resulta em soluções distintas para a função de onda, as quais serão apresentadas no próximo tópico.

2.2.3 Sistemas quânticos utilizados

Em todos os sistemas quânticos analisados nessa pesquisa consideramos as soluções e casos em que a energia da partícula é menor que potencial da barreira, isto é $V(x) > E$. Para casos em que segue o comportamento oposto não foram analisados porém, suas soluções e efeitos quando mudamos de perspectiva podem ser encontrados em (Eisberg; Resnick, 1986).

Degrau de potencial

O potencial degrau independente do tempo, considerado um sistema quântico simples, é definido por

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x > 0 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.17)$$

Esse sistema pode ser idealizado como o potencial existente entre dois eletrodos submetidos a tensões ligeiramente diferentes. A equação de Schrödinger para o potencial degrau é dada por 2.15 cuja solução analítica para a função de onda $\psi(x)$ é

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & x < 0, \\ Ce^{-k_2x}, & x \geq 0. \end{cases} \quad (2.18)$$

onde A, B e C são constantes que representam as amplitudes das ondas. As constantes k_1 e k_2 representam os números de ondas associados a partícula-onda fora e dentro do potencial, e são respectivamente

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (2.19)$$

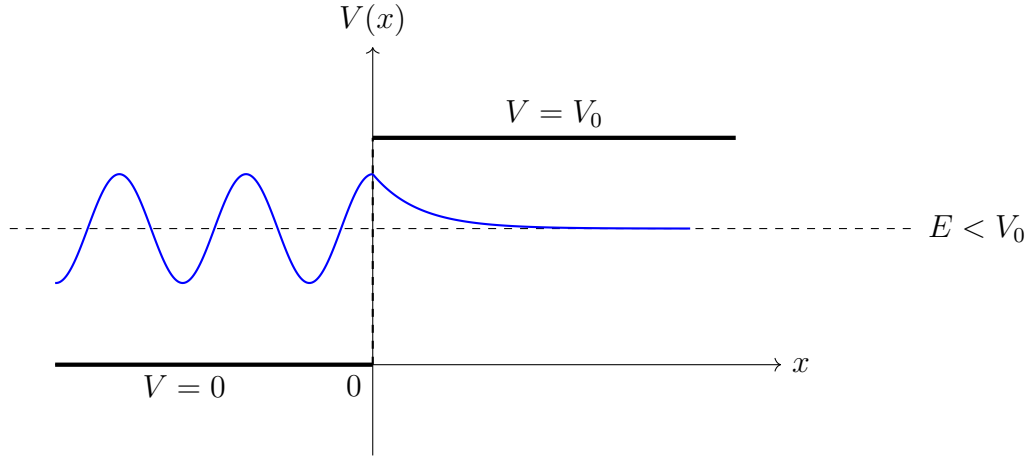


Figura 2.3: Função de onda no potencial degrau com $E < V_0$. O potencial degrau encontra-se em $x > 0$.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Poço Potencial

O problema do poço de potencial com barreiras infinitas consiste em uma partícula de massa m e energia E confinada por um potencial. Esse potencial apresenta barreiras infinitas em suas extremidades e valor nulo em sua região central Fig.(2.4)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \\ \infty, & x \leq 0 \text{ ou } x \geq L. \end{cases} \quad (2.20)$$

Sendo L a largura do poço. A solução analítica da Eq.2.16 é dada por

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (2.21)$$

onde n é o número quântico principal, responsável por determinar os níveis de energia nos quais a partícula pode ocupar. Esse sistema pode ser interpretado, de forma idealizada, como um modelo unidimensional análogo ao átomo de hidrogênio, considerando um comprimento característico $L = 0,53$. A constante de normalização A é obtida impondo a condição de normalização da função de onda, resultando em $A = \sqrt{2/L}$ (Cohen-Tannoudji; Diu; Laloë, 2019). Embora a solução geral da equação diferencial envolva uma combinação linear de funções seno e cosseno, as condições de contorno impostas pelo poço de potencial infinito selecionam apenas a solução senoidal fisicamente admissível, levando à expressão

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (2.22)$$

Esse modelo constitui um exemplo fundamental de quantização de energia, ilustrando como a energia de uma partícula pode assumir apenas valores discretos em sistemas confinados.

Além disso, ele é amplamente utilizado no estudo de estados estacionários em sistemas quânticos. De acordo com o princípio da correspondência (Eisberg; Resnick, 1986), para valores elevados do número quântico n , o comportamento quântico tende a se aproximar do comportamento clássico, sendo descrito por valores médios das grandezas físicas.

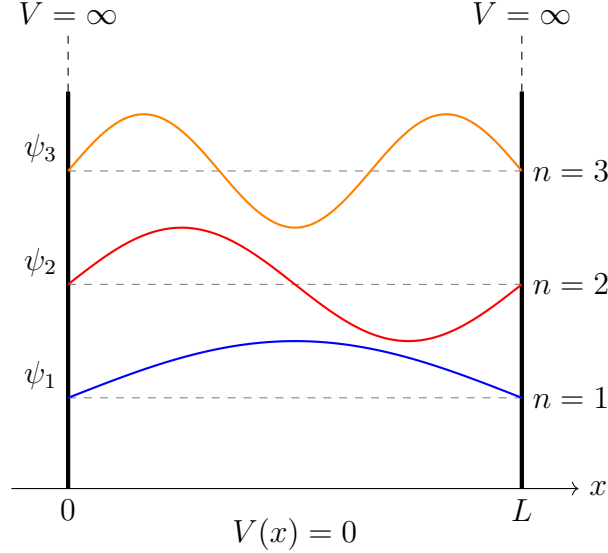


Figura 2.4: Primeiros modos oscilantes (funções de onda) no poço de potencial infinito em função do número quântico n .

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Barreira de Potencial

A barreira de potencial é caracterizada por um potencial eletrônico constante, $V(x)$, definido em um intervalo específico,

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } 0 < x < a, \\ 0, & \text{se } x < 0 \text{ ou } x > a. \end{cases} \quad (2.23)$$

Sendo a o comprimento da barreira, como mostrado na Fig.(2.5). Se a energia da barreira não for muito maior do que a energia da partícula, existe uma probabilidade de que a partícula seja transmitida para a região $x > a$, fenômeno conhecido como tunelamento quântico expressa novamente o comportamento ondulatório da matéria e é responsável por diversos fenômenos observados experimentalmente (Eisberg; Resnick, 1986).

A solução da equação de Schrödinger dependem de constantes multiplicativas, que descrevem ondas incidentes, refletidas e transmitidas quando interagem com a barreira.

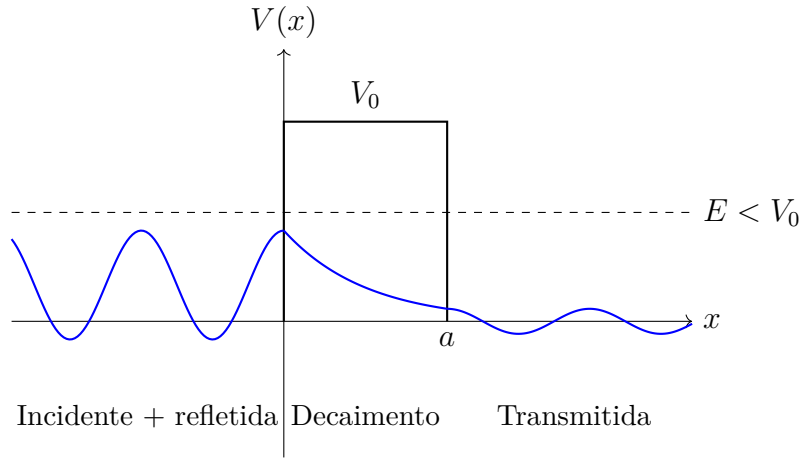


Figura 2.5: Efeito de tunelamento quântico em uma região não permitida classicamente ($E < V(x)$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Barreira dupla de potencial

O problema da barreira dupla de potencial é mais complexo do que o da barreira simples, uma vez que envolve não apenas o fenômeno de transmissão (tunelamento quântico), mas também a reflexão de partículas, tanto no interior quanto no exterior da região delimitada pelas barreiras. De forma análoga à interação entre dois átomos ou duas cavidades, o sistema apresenta interferência construtiva e destrutiva das ondas que se propagam entre as barreiras. Essas interferências são fundamentais para o fenômeno conhecido como efeito de tunelamento ressonante, no qual, sob condições específicas, a probabilidade de transmissão da partícula é aumentada devido à formação de ondas coerentes no interior da cavidade formada entre as barreiras. Esse efeito é análogo ao comportamento observado em cavidades ressonantes, nas quais a presença de múltiplas barreiras permite que as ondas incidentes se alinhem em fases específicas, aumentando a transmissão através do potencial.

A região compreendida entre as barreiras pode ser modelada como uma cavidade quântica, na qual ocorre a interferência das ondas (regiões coloridas na Fig. 2.6). As características da função de onda, incluindo picos de transmissão e nós de reflexão, refletem as condições específicas do sistema, tais como as energias das partículas e as distâncias relativas entre as barreiras. Esse comportamento é mais complexo devido à natureza não trivial das equações que governam o sistema. As funções de onda devem ser obtidas levando em consideração as condições de contorno impostas pela geometria do potencial. A solução geral para a função de onda pode ser escrita como

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & \text{se } x < 0, \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, & \text{se } 0 \leq x \leq a, \end{cases} \quad (2.24)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & \text{se } a < x < b, \\ Ce^{ik_3x} + De^{-ik_3x}, & \text{se } b \leq x \leq c, \\ Fe^{ik_1x}, & \text{se } x > c. \end{cases} \quad (2.25)$$

onde A e B representam as amplitudes das ondas incidente e refletida na primeira barreira (lado esquerdo); C e D correspondem às amplitudes das ondas transmitida e refletida no interior da região da primeira barreira; E e F descrevem as ondas incidentes sobre a segunda barreira. Obviamente, os intervalos $[0, a]$ refere-se a primeira barreira, (a, b) ao espaço entre as barreiras e $[b, c]$ a segunda barreira. Uma representação desse sistema pode ser vista a seguir

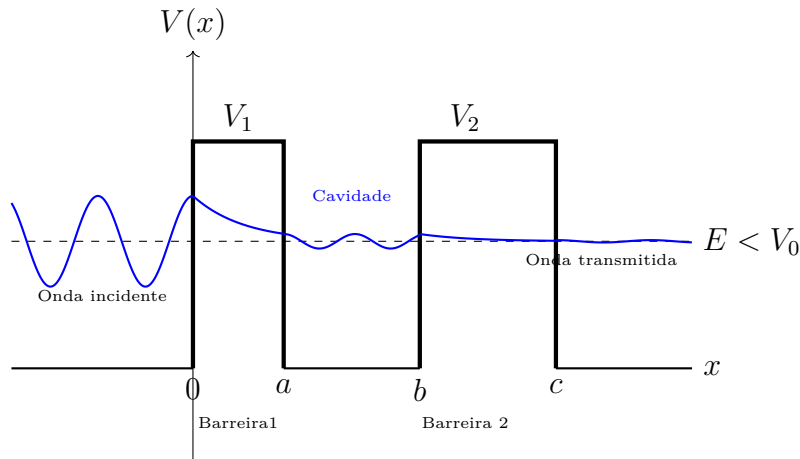


Figura 2.6: Sistema de barreira dupla de potencial para valores de $V_1, V_2, E, m, \hbar, a, b, c$ e suas respectivas constantes multiplicativas vistas na Equação (2.25). A função de onda apresenta decaimento nas barreiras e um comportamento oscilatório na cavidade central ($a < x < b$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Potencial do Oscilador Harmônico Quântico

Nos sistemas discutidos anteriormente, todos os potenciais eram funções contínuas da posição. O oscilador harmônico quântico, entretanto, representa um sistema físico fundamental, com ampla aplicação tanto em teoria quanto em experimentos, cujo potencial varia espacialmente. Esse sistema descreve qualquer partícula que apresente oscilações em torno de um ponto de equilíbrio estável, como átomos vibrando em moléculas ou modos vibracionais em sólidos.

Na mecânica clássica, a energia associada a uma partícula sujeita ao potencial do oscilador harmônico pode assumir qualquer valor, uma vez que a partícula pode possuir energias arbitrariamente pequenas ou extremas. Contudo, a mecânica quântica impõe restrições importantes; a energia total do sistema - partícula não pode assumir valores contínuos (Fig. 2.7, apenas valores quantizados quantizada. Isso ocorre devido à natureza

discreta dos estados de energia permitidos pelo sistema, os quais são determinados pela solução da equação de Schrödinger para o potencial harmônico. O potencial do oscilador harmônico é dado por

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (2.26)$$

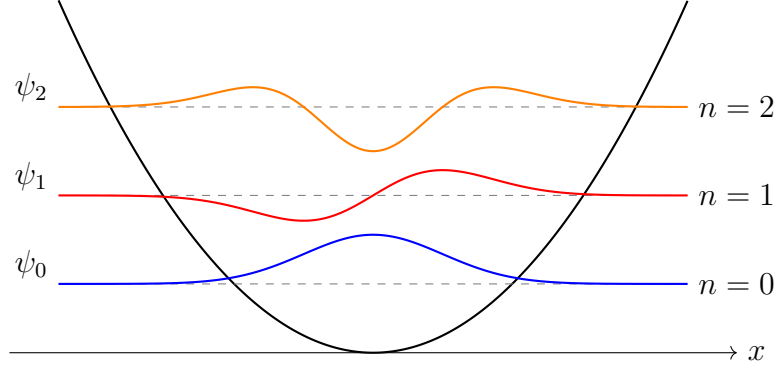


Figura 2.7: Potencial e primeiras funções de onda do oscilador harmônico quântico.
Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

onde m é a massa da partícula e ω é a frequência angular de oscilação. A solução da equação de Schrödinger para esse sistema resulta em funções de onda quantizadas e níveis de energia discretos,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

em que ω é a frequência angular do movimento no potencial. O menor valor de energia permitido é conhecido como energia do ponto zero,

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega,$$

a qual é exigida pelo princípio da incerteza. Os níveis de energia subsequentes são igualmente espaçados por múltiplos de $\hbar\omega$. A equação de Schrödinger para esse sistema é mais complexa do que aquelas discutidas anteriormente, assim como suas soluções, obtidas substituindo o potencial $V(x)$ na Eq. (2.15) por Cx^2 . Ela descreve a evolução do sistema físico no espaço sob o potencial quadrático.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}Cx^2\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.28)$$

cujas soluções envolvem métodos algébricos mais elaborados, resultando em um produto de duas partes: uma parte Gaussiana, $\exp(-u^2)$ e uma parte polinomial, conhecida como os polinômios de Hermite $H(u)$. As primeiras funções de onda normalizadas são dadas por

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2}, \quad (2.29)$$

$$\psi_1(u) = A_1 u e^{-u^2/2}, \quad (2.30)$$

$$\psi_2(u) = A_2 (2u^2 - 1) e^{-u^2/2}, \quad (2.31)$$

$$\psi_3(u) = A_3 (2u^3 - 3u) e^{-u^2/2}. \quad (2.32)$$

Esses sistemas vistos nesse capítulo são os benchmarks para aplicarmos nossa proposta de solução da equação diferencial por meio de um aproximador universal, isto é, a Rede Neural Informada por Física, uma vez que são equações de um sistema físico complexo e que possuem soluções analíticas conhecidas.

Capítulo 3

Fundamentação metodológica computacional

3.1 Redes Neurais Informadas por Física

Conforme mencionamos na introdução dessa dissertação, redes neurais possuem uma gama de aplicações em diversos campos do conhecimento. Devido aos esforços de diversos pesquisadores, as Redes Neurais Informadas por Física (PINNs) fundamentam-se com o propósito em fornecer a rede neural aspectos físicos do sistema que estamos focados em descrevê-lo e que ela aprenda tais comportamentos que descrevem o sistema. Esse foco científico teve início com Lagaris et al. descrevendo um método para resolver equações diferenciais. Segundo os autores "Diferente de métodos numéricos clássicos, o emprego de uma arquitetura neural permite que a solução seja obtida em uma 'forma analítica fechada e diferenciável, facilmente usada em qualquer cálculo subsequente (Lagaris; Likas; Fotiadis, 1998)

Mais recentemente, essa técnica foi popularizada e expandida por Raissi, Perdikaris e Karniadakis, que consolidaram o uso da diferenciação automática para minimizar os resíduos das equações diferenciais diretamente na função de perda (Raissi; Perdikaris; Karniadakis, 2017). Além disso, trabalhos contemporâneos como os de Baty e Baty (Bat-Erdene *et al.*, 2022) e Navarro, Moreno e Rodrigo (Navarro; Martin-Moreno; Rodrigo, 2024) reforçam que a grande vantagem das PINNs reside na capacidade de prever soluções com uma quantidade mínima de dados, utilizando o conhecimento prévio da física para guiar a otimização em problemas complexos.

Diante desse contexto, torna-se natural investigar de forma mais detalhada a formulação matemática das PINNs e o modo como o conhecimento físico é incorporado ao treinamento da rede neural, para que as soluções satisfaçam a equação diferencial e as condições de contorno simultaneamente. Assim, na próxima seção, apresenta-se a estrutura

geral dessas redes, destacando a construção da função de perda e o papel da diferenciação automática na imposição das equações diferenciais e das condições do problema .

3.1.1 Formulação Geral das PINNs

O Objetivo de uma PINN é encontrar uma solução aproximada da equação diferencial (2.1), isto é, $\hat{y}_\theta(x) \approx y(x)$, assim como suas respectivas derivadas ($\hat{y}'_\theta(x) \approx y'(x)$, $\hat{y}''_\theta(x) \approx y''(x)$, $\dots$). Para isso, o método é composto por uma sucessão de passos como representado na Fig. (3.1) em sua forma mais simplificada. Inicia-se com a rede neural aceitando um vetor de pontos $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, com $x_i \in \Omega$, o domínio no qual foi discretizado seguindo o método de colocação (Lagaris; Likas; Fotiadis, 1998). Geralmente, esse vetor de pontos também engloba a condição de contorno (CC) $\partial\Omega$, que podem ser definidos por via Neumann ou Dirchlet (Boyce; DiPrima; Meade, 2017)

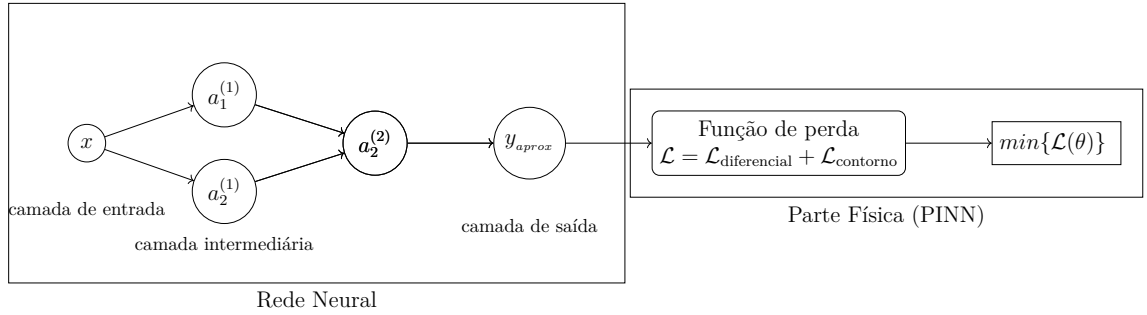


Figura 3.1: Esquema geral de uma Rede Neural Informada por Física (simplificada), indicando as camadas de entrada, ocultas e de saída, as ativações internas $a_i^{(l)}$, a aproximação da solução $\psi(x)$ e a construção da função de perda física.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

A rede neural realiza operações internas nas camadas intermediárias por meio de combinações lineares entre as ativações da camada anterior e os parâmetros treináveis, seguidas da aplicação de funções não lineares. Em particular, a saída linear do i -ésimo neurônio da l -ésima camada é dada por

$$z_i^{(l)} = \sum_{k=1}^{N_{l-1}} W_{ik}^{(l)} a_k^{(l-1)} + b_i^{(l)}, \quad (3.1)$$

onde N_{l-1} representa o número de neurônios da camada anterior, $W_{ik}^{(l)}$ são os pesos sinápticos associados às conexões entre o k -ésimo neurônio da camada $(l-1)$ e o i -ésimo neurônio da camada l , e $b_i^{(l)}$ é o termo de polarização (bias). A quantidade $z_i^{(l)}$ corresponde à saída linear do neurônio, a partir da qual se obtém a ativação não linear $a_i^{(l)}$ por meio da aplicação de uma função de ativação apropriada.

No contexto das Redes Neurais Informadas por Física, o processo de aprendizado é formulado como um problema de otimização. Definindo a equação geral da seguinte forma

$$\mathcal{D}(y) - \mathcal{F} = 0 \quad (3.2)$$

onde $\mathcal{D}(\cdot)$ é o operador diferencial e $\mathcal{F}$ o termo de força. Seja $\hat{y}_\theta$ a saída da rede neural como uma solução proposta à $\mathcal{D}(\cdot)$. Logo, o resíduo ao tentar aproximar $\hat{y}_\theta$ com sua solução verdadeira y é

$$\mathcal{L}(\hat{y}_\theta) = \mathcal{D}(\hat{y}_\theta) - \mathcal{F} \quad (3.3)$$

A ideia é usar o $\mathcal{L}^2(\hat{y}_\theta)$ como a função de custo a ser minimizada durante o processo de treinamento. Para isso, busca-se determinar o conjunto de parâmetros $\theta = \{W, b\}$ que minimiza uma função de custo, ou seja, $\mathcal{L}(\theta) \approx 0$. Essa função é construída de modo a penalizar simultaneamente o descumprimento da equação diferencial governante e das condições de contorno do problema, sendo definida como

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathcal{L}_{\text{diferencial}}(\theta) + \mathcal{L}_{\text{contorno}}(\theta). \quad (3.4)$$

O termo associado à equação diferencial é dado por

$$\mathcal{L}_{\text{diferencial}}(\theta) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left[\mathcal{D}(\vec{x}_i, \hat{y}_\theta(\vec{x}_i), \nabla \hat{y}_\theta(\vec{x}_i), \nabla^2 \hat{y}_\theta(\vec{x}_i), \dots, \nabla^k \hat{y}_\theta(\vec{x}_i)) \right]^2, \quad (3.5)$$

enquanto o termo correspondente às condições de contorno é expresso por

$$\mathcal{L}_{\text{contorno}}(\theta) = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} [\partial \Omega(\vec{x}_i, \hat{y}_\theta(\vec{x}_i))]^2, \quad (3.6)$$

A minimização da função de custo é realizada por meio de algoritmos de otimização baseados em gradiente, utilizando a diferenciação automática para o cálculo exato das derivadas necessárias. De forma genérica, a atualização dos parâmetros da rede ao longo das iterações do treinamento pode ser escrita como

$$W^{(m+1)} = W^{(m)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial W}, \quad (3.7)$$

$$b^{(m+1)} = b^{(m)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial b}, \quad (3.8)$$

onde η é a taxa de aprendizado e m denota o índice da iteração do processo de otimização. Um aspecto fundamental das PINNs é que as derivadas da saída da rede em relação às variáveis independentes são computadas automaticamente, permitindo a avaliação direta

dos operadores diferenciais presentes na função de custo. Em particular, derivadas de p -ordem arbitrária da aproximação neural podem ser obtidas na forma

$$F(x, \hat{y}_\theta) = f \left(x, \hat{y}_\theta, \frac{\partial \hat{y}_\theta}{\partial x}, \frac{\partial^2 \hat{y}_\theta}{\partial x^2}, \dots, \frac{\partial^p \hat{y}_\theta}{\partial x^p} \right) \quad (3.9)$$

garantindo que a imposição das leis físicas seja realizada de maneira contínua e diferenciável ao longo de todo o domínio do problema. Portanto, o aprendizado via pinn diferencia do aprendizado convencional por não depender de dados rotulados, mas sim das condições impostas pelo contorno que respeitem as leis físicas e da minimização da função de custo, definida pela própria equação diferencial que descreve o sistema físico. Essa característica torna o método particularmente poderoso para sistemas quânticos, onde a solução deve satisfazer a continuidade e a normalização de forma global.

3.1.2 Redes Neurais de Schrödinger

Redes neurais de Schrödinger é um modo simplório de dizer que a PINN é definida pela própria equação de onda da mecânica quântica e pelos contornos impostos do sistema, uma vez que a mecânica quântica é definida em sistemas fechados. Dessa forma, define-se a função de custo (*loss*) que a rede deve minimizar

$$\mathcal{L}(x, t; \theta) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) - i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.10)$$

Para o caso utilizado na nossa pesquisa, o Schrödinger independente do tempo, temos

$$\mathcal{L}(x; \theta) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \hat{\psi}(x)}{dx^2} + V(x) \hat{\psi}(x) - E \hat{\psi}(x) \quad (3.11)$$

onde $\hat{\psi}(\cdot)$ é a possível solução da rede neural que depende parâmetros $\theta(W, b)$ e dos aspectos físicos; o potencial que estamos considerando e sua energia. Esse método de soluções de equações diferenciais da mecânica quântica foram aplicados em duas propostas de redes neurais; via código utilizando *Framework Pytorch* e abordagem via *Framework Neurodiffeq*:

3.2 Arquitetura das redes neurais via Frameworks

A contribuição deste trabalho consiste na aplicação sistemática e na análise computacional de Redes Neurais Informadas por Física (PINNs) para a resolução de sistemas quânticos unidimensionais descritos pela equação de Schrödinger independente do tempo. O foco não reside no desenvolvimento de um novo método de aprendizado de máquina, mas na avaliação crítica do desempenho, da estabilidade numérica e da

reprodutibilidade das PINNs sob diferentes escolhas arquiteturais, estratégias de imposição de condições de contorno e formas de implementação computacional.

Com esse objetivo, foram consideradas duas abordagens complementares: uma implementação manual baseada em PyTorch e uma implementação orientada a framework por meio da biblioteca Neurodiffq. Essa escolha permite comparar explicitamente o nível de controle computacional, a flexibilidade e o grau de generalização de cada estratégia no contexto de problemas quânticos espectrais. Tais arquiteturas foram definidas seguindo os seguintes itens:

1. **Discretização do domínio (Dataset):** O domínio espacial unidimensional foi discretizado por meio de pontos de colocação uniformemente distribuídos no intervalo (x_i, x_f) . Em todas as simulações foram utilizados $N = 100$ pontos internos no domínio, além de pontos adicionais associados às fronteiras. As condições de contorno do tipo Dirichlet foram impostas por meio de termos de penalização quadrática adicionados à função de perda, caracterizando uma imposição fraca das condições de contorno.
2. **Arquitetura da rede:** As PINNs empregadas possuem arquitetura do tipo totalmente conectada (*feedforward*), composta por uma camada de entrada, três camadas ocultas com 32 neurônios cada e uma camada de saída. Essa configuração foi escolhida após testes exploratórios, apresentando bom compromisso entre capacidade de aproximação funcional e estabilidade numérica durante o treinamento.
3. **Estratégia de treinamento e otimização:** O treinamento foi realizado em duas fases distintas. Inicialmente, utilizou-se o otimizador Adam, visando uma exploração eficiente do espaço de parâmetros e uma redução rápida da função de perda. Em seguida, o método quasi-Newtoniano LBFGS foi empregado para o refinamento da solução, favorecendo a convergência do resíduo da equação diferencial. A taxa de aprendizagem foi ajustada empiricamente, assumindo valores da ordem de 10^{-3} e 10^{-4} , conforme a estabilidade do treinamento observada em cada sistema físico. O número de épocas variou entre 10^3 e 10^4 , sendo o critério de parada associado à estabilização da função de perda e à saturação das métricas de erro. Foram utilizadas duas funções de ativação distintas ao longo dos experimentos: $\tanh(x)$, $\tanh(x) + \sin(x)$. A função $\tanh(x)$ foi empregada como ativação padrão devido à sua suavidade e às propriedades favoráveis de estabilidade numérica na avaliação de derivadas de ordem superior, características essenciais em PINNs. A combinação $\tanh(x) + \sin(x)$ foi adotada com o objetivo de enriquecer a capacidade da rede em representar comportamentos oscilatórios, típicos de soluções da equação de Schrödinger, mitigando o viés espectral associado a funções de ativação puramente suaves. .

4. **Função de custo e formulação física:** A função de custo foi definida conforme a Eq. 3.11, sendo composta pelo resíduo da equação de Schrödinger independente do tempo e pelos termos associados às condições de contorno. Nas simulações apresentadas, a energia da partícula E foi considerada fixa assim como o potencial $V(x)$ (com exceção do oscilador harmônico quântico) e em todos os casos $V(x) > E$, permitindo a análise direta da capacidade da PINN em reproduzir estados estacionários para diferentes perfis de potencial, incluindo potencial degrau, barreira simples, barreira dupla, poço infinito e o oscilador harmônico quântico, com $V(x) = Cx^2$.
5. **Métricas de desempenho:** O desempenho computacional das PINNs foi avaliado a partir de métricas complementares. Quando a solução analítica estava disponível, utilizou-se o erro quadrático médio (MSE) para quantificar a precisão da aproximação funcional. Como complementação, usamos o erro relativo L2 para avaliar a eficiência global da pinn comparada a função analítica. Adicionalmente, a convergência da função de perda total foi monitorada ao longo do treinamento, fornecendo uma medida direta do grau de satisfação da equação diferencial e das condições de contorno. Utilizamos o *loss* (Eq. 3.3), baseada no resíduo físico constitui o principal critério de validação nos casos em que a solução analítica não é conhecida.

Implementação via Pytorch

Na implementação baseada em PyTorch, a formulação da PINN é realizada de maneira explícita, permitindo a inserção manual não apenas das condições de contorno, mas também das derivadas obtidas a partir da solução analítica conhecida do problema, assim como os contornos. Essa estratégia possibilita que a rede neural realize comparações diretas entre a solução aproximada e quantidades físicas previamente calculadas, como derivadas de primeira e segunda ordem, conduzindo a ajustes *a priori* mais refinados durante o treinamento. Como consequência, o processo de otimização torna-se mais controlado e dirigido, sendo particularmente adequado para problemas nos quais a solução exata é conhecida ou pode ser parcialmente utilizada como referência. Além disso, adotamos uma estratégia de partição do domínio espacial em subdomínios, associando-se uma rede neural a cada partição. Essa abordagem permite investigar os efeitos da decomposição do domínio na estabilidade do treinamento, na propagação de erros e na qualidade da aproximação global da solução.

Implementação via Neurodiffee

Por outro lado, na implementação utilizando o *framework* Neurodiffee, a rede neural é treinada a partir da especificação direta da equação diferencial e das condições de contorno, sem a necessidade de fornecer explicitamente derivadas analíticas da solução.

Nesse caso, a PINN busca generalizar a solução do problema exclusivamente a partir das leis físicas impostas na função de perda e das informações disponíveis nos contornos do domínio e com apenas uma rede neural. Embora essa abordagem seja menos detalhada do que a implementação manual em PyTorch, ela apresenta um caráter mais geral, sendo particularmente relevante em situações nas quais a solução analítica é desconhecida ou quando não é possível impor derivadas exatas como restrições adicionais. Dessa forma, o Neurodiffeq oferece uma estrutura mais flexível e amplamente aplicável para problemas físicos complexos.

Na próxima seção, iremos analisar a robustez de ambos os métodos, compará-los sobre sistemas físicos e além disso, propomos melhoras significativas para solucionar sistemas físicos complexos utilizando a implementação via Neurodiffeq.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Sistemas Independentes do Tempo

Como discutimos no Capítulo 3, propomos obter as soluções da equação de onda de Schrödinger para a mecânica quântica sobre diferentes tipos de potenciais, utilizando arquiteturas de redes neurais via *NeuroDiffEq* (Chen *et al.*, 2020) e *PyTorch* (Imambi; Prakash; Kanagachidambaresan, 2021) (Paszke *et al.*, 2017). O foco desta análise é comparar a capacidade de convergência e a estabilidade de ambas as abordagens.

4.1.1 Potencial Degrau ($V > E$)

Sendo o potencial mais simples, realizamos as simulações considerando um potencial constante com valor numérico superior à energia da partícula. Para as simulações, definimos $V = 4$ e $E = 3$. O objetivo é observar como as redes lidam com a transição entre a região oscilatória e a região de decaimento.

Especificações das Arquiteturas e Hiperparâmetros

Ambas as redes foram estruturadas como Redes Neurais Totalmente Conectadas (*Fully Connected Neural Networks* - FCNN), porém com estratégias de otimização e ativação distintas, conforme resumido na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq.

Parâmetro	Implementação PyTorch	Implementação NeuroDiffEq
Arquitetura	3 camadas (32 neurônios)	3 camadas (32 neurônios)
Função de Ativação	$\tanh(x)$	$\sin(x) + \tanh(x)$
Otimizador	Adam	LBFGS
Taxa de Aprendizado (lr)	0,0001	0,0001
Critério de Erro	MSE	MSE
Épocas de Treino	10.000	1.000

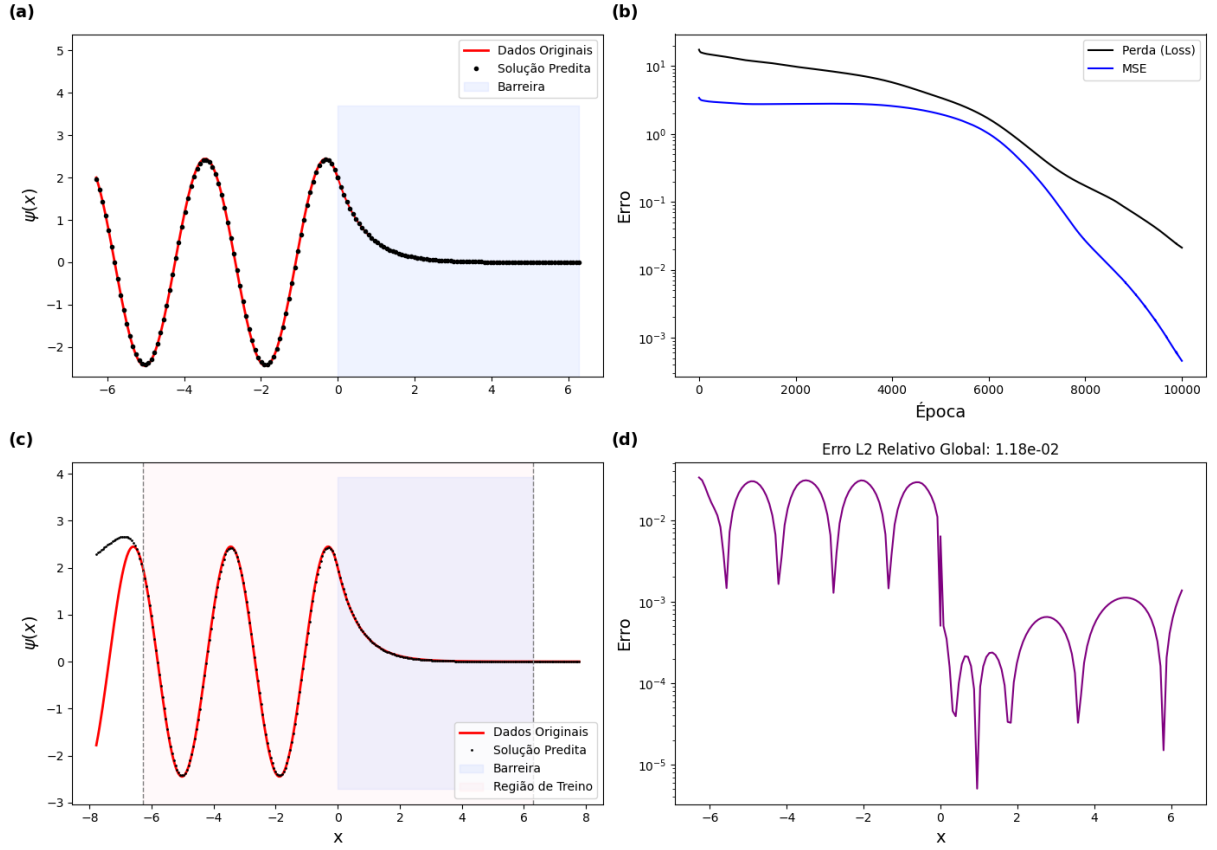


Figura 4.1: Simulação utilizando a arquitetura em PyTorch.
 Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Análise Computacional

- Convergência, erro e generalização (PyTorch):** A implementação em PyTorch (Figura 4.1) demonstrou uma convergência estável durante o processo de treinamento ao longo das 10^3 épocas e esse reflexo é observado através do MSE que cai suavemente (erro mínimo de 10^{-3}) e o erro físico por volta de 10^{-2} . Por não demonstrar *plateau* ao fim do treinamento conseguimos ainda mais melhorar esses resultados com mais épocas. Ao longo do gráfico 4.1(c), demonstramos a capacidade da PINN generalizar fora do domínio de treinamento; a PINN por ser definida em intervalos fechados não sabe o que tem além desses pontos extremos e geralmente há erros expressivos de extrapolação (Navarro; Martin-Moreno; Rodrigo, 2024). O erro L2 relativo global de 1.18×10^{-2} (Figura 4.1 d) reflete uma excelente aderência aos dados originais, com um decaimento significativo quando aproxima-se da borda esquerda do intervalo.)
- Convergência, erro e generalização (NeuroDiffEq):** a implementação pela neurodiffEq (Figura 4.2) apresentou dificuldades razoáveis de estabilização. Embora a função de perda apresente uma queda acentuada nas primeiras 200 épocas, marcado pela declive do gráfico da (Figura 4.2 b), o algoritmo ficou preso nos estágios finais do treinamento (acima de 200 épocas) formando um *plateau*. Uma explicação plausível

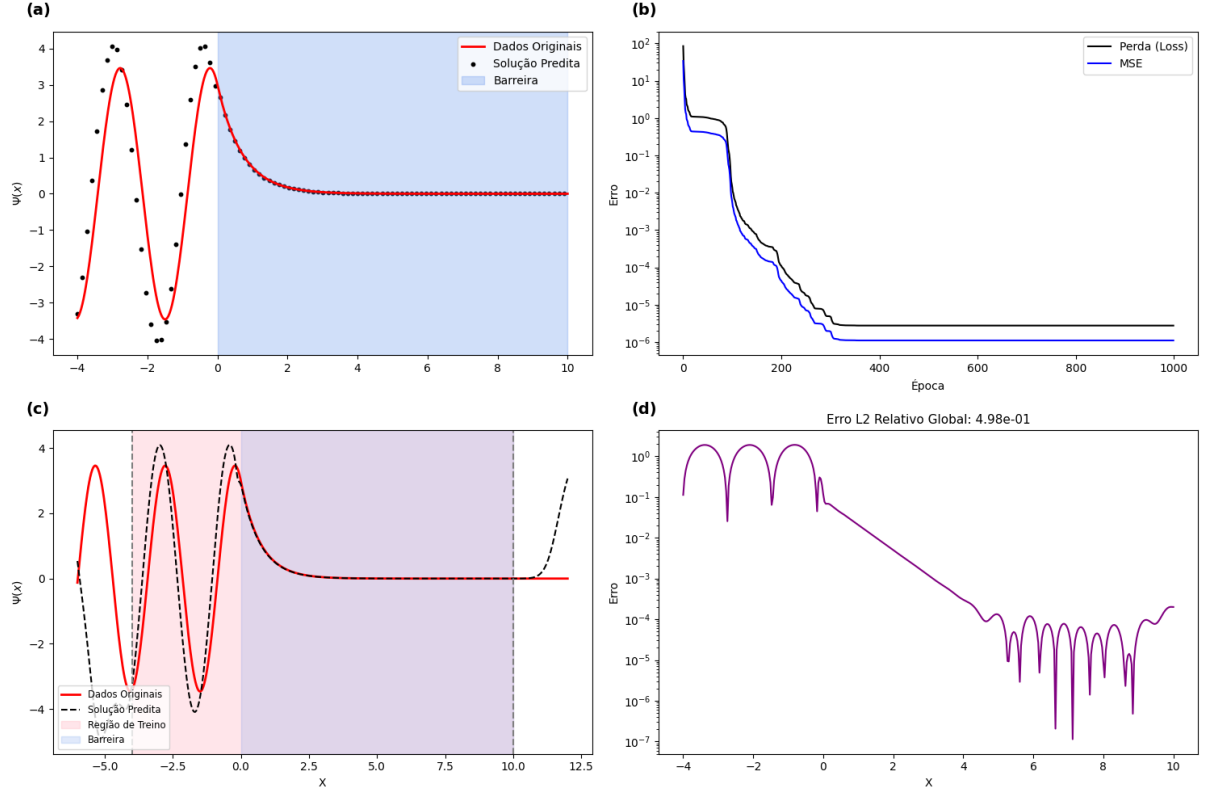


Figura 4.2: Simulação utilizando a biblioteca NeuroDiffEq.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

para esse comportamento é que o processo de otimização tenha convergido para um mínimo local da superfície de perda, sem atingir o mínimo global associado ao conjunto de parâmetros considerado. Embora a rede neural tenha ficado presa em um mínimo local, isso não foi o suficiente para produzir uma solução aproximada inadequada para o sistema considerado, captando seu comportamento geral. É importante destacar que as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo pertencem a um espaço vetorial, sendo combinações lineares de autofunções do operador Hamiltoniano. Dessa forma, pequenas variações nos parâmetros da rede podem ainda produzir aproximações fisicamente consistentes, mesmo que o mínimo global da função de perda não seja estritamente alcançado, significando que a rede acerta em atender a parte física de aproximar a equação diferencial mais fortemente do que atender as condições de contorno. O erro relativo global de 4.98×10^{-1} ; como visto na Figura 4.2d. Em comparação com a Figura 4.1d demonstrou uma aproximação satisfatória, sendo que o número de épocas foi 10 vezes menor em comparação pela , embora tenha tido mais problemas nas bordas do domínio do que via Pytorch. Assim como (Fig. 4.1 d) a rede ajusta bem dentro do domínio e erra fora desse, aqui observamos uma inversão de fase na função de onda do lado direito e uma erro crescente exponencial do lado esquerdo.

Análise Física

Do ponto de vista da mecânica quântica, o sistema representa uma partícula incidindo em uma barreira de potencial onde não possui energia clássica suficiente para ultrapassá-la. Na região classicamente permitida ($x < 0$), a solução esperada é uma combinação de ondas incidentes e refletidas, resultando em um comportamento oscilatório. A rede implementada em /NeurodifEq capturaram perfeitamente essa periodicidade. Na região classicamente proibida ($x > 0$), a teoria prevê o tunelamento com decaimento exponencial (a função de onda penetra na barreira mas tende a zero). Novamente, ambas as redes replicaram fielmente este comportamento; uma onda senoidal e um decaimento exponencial.

4.1.2 Potencial Barreira ($V > E$)

Nesta configuração, a partícula enfrenta uma barreira de potencial de largura finita $a = 3$, com altura $V = 4$ superior à sua energia $E = 3$. Este cenário introduz maior complexidade computacional, exigindo que a rede neural aprenda a continuidade da função de onda e de sua primeira derivada em dois pontos distintos de interface ($x = 0$ e $x = 3$).

Especificações das Arquiteturas e Hiperparâmetros

Para este sistema, as especificações técnicas foram ajustadas visando a convergência em múltiplas regiões. O comparativo detalhado encontra-se na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Potencial de Barreira.

Parâmetro	Implementação PyTorch	Implementação NeuroDiffEq
Arquitetura	3 camadas (32 neurônios)	3 camadas (32 neurônios)
Função de Ativação	$\tanh(x)$	$\sin(x) + \tanh(x)$
Otimizador	Adam	LBFGS
Taxa de Aprendizado (lr)	0,0001	0,001
Critério de Erro	MSE	MSE
Épocas de Treino	10.000	5000

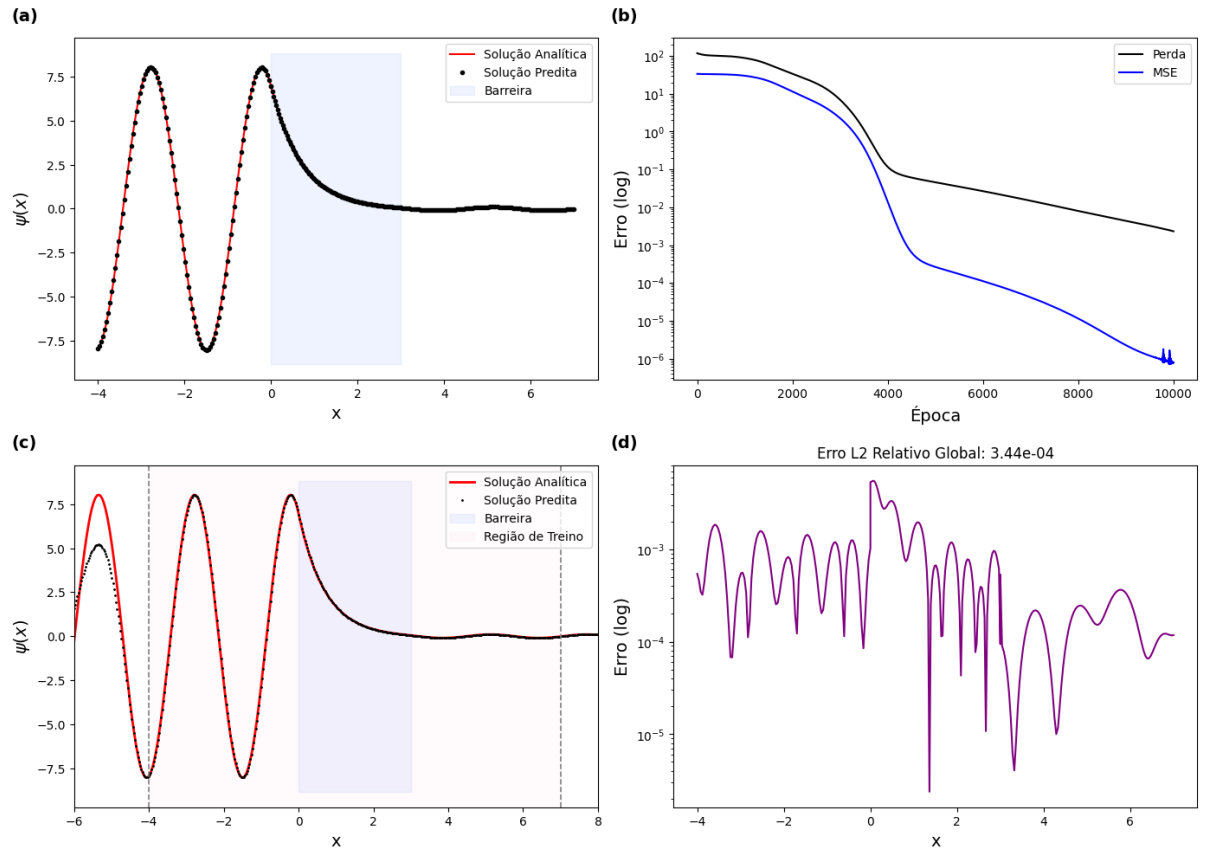


Figura 4.3: Resultados da simulação via PyTorch utilizando decomposição de domínio (três redes).

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

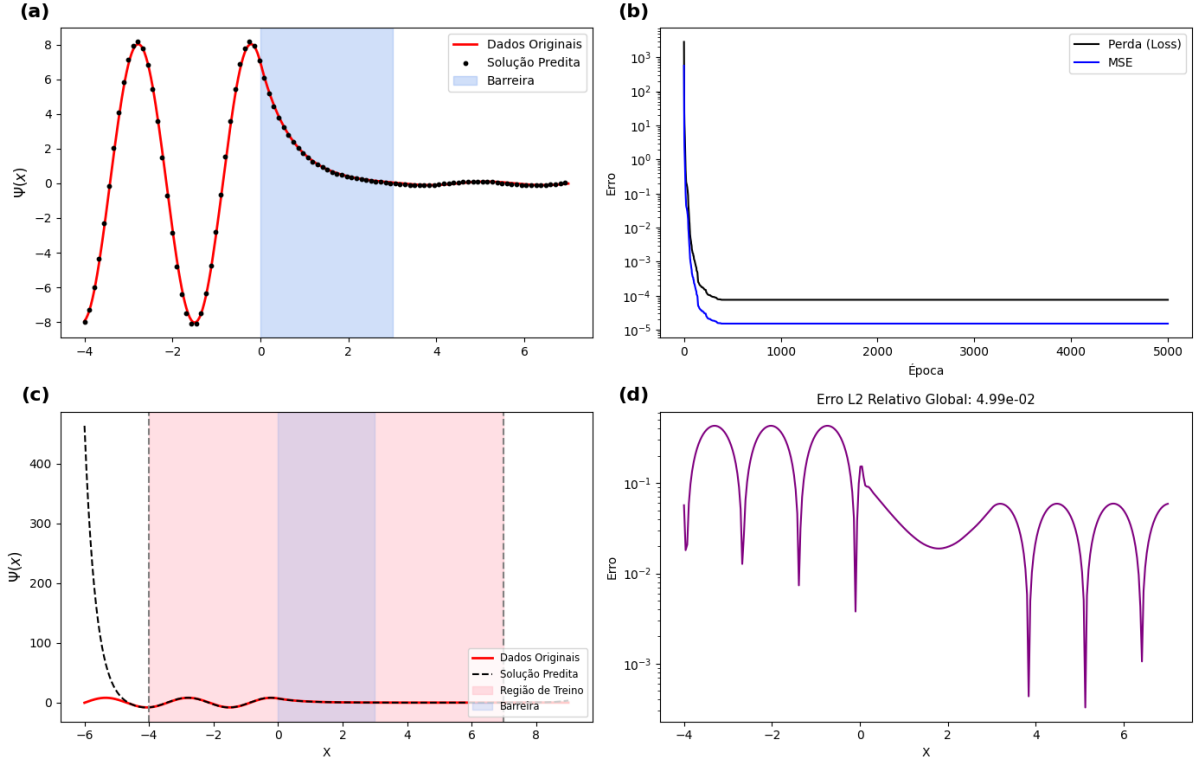


Figura 4.4: Resultados da simulação via NeuroDiffEq utilizando rede única.
 Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Análise Computacional

A análise dos resultados demonstra que a estratégia de “dividir para conquistar” aplicada no PyTorch foi significativamente mais eficaz para este potencial:

- Decomposição de domínio (PyTorch):** A estratégia de particionamento do domínio, com o treinamento de três redes independentes associadas a subregiões do espaço, resultou em um erro relativo global em norma L^2 de $3,44 \times 10^{-4}$. A função de ativação $\tanh(x)$ mostrou-se particularmente adequada para capturar as oscilações da função de onda, preservando sua regularidade e comportamento assintótico. Observa-se, ainda, um decaimento progressivo e estável tanto da função de perda quanto do MSE (Figura 4.3b), indicando boa estabilidade numérica e convergência consistente ao longo do treinamento. A decomposição de domínio contribuiu para reduzir a complexidade local do problema, favorecendo a aproximação em cada subregião.
- Otimização via LBFGS e formulação como IVP (NeuroDiffEq):** Na implementação com NeuroDiffEq, utilizando o otimizador LBFGS, verificou-se rápida redução inicial da função de perda, seguida por estabilização após aproximadamente 10^3 épocas. Esse comportamento sugere convergência para uma região de mínimo local da superfície de perda, possivelmente associada à bacia de atração determinada pela inicialização dos parâmetros. Diferentemente de métodos estocásticos, o LBFGS

apresenta menor capacidade de escapar de tais regiões em paisagens altamente não convexas, como ocorre em PINNs. O erro relativo em norma L^2 permaneceu da ordem de 10^{-2} , indicando que, embora a convergência tenha sido rápida, a qualidade global da aproximação foi inferior à obtida na abordagem particionada.

Análise Física

O comportamento simulado descreve o fenômeno de tunelamento quântico através de uma barreira finita. Nas Regiões ($x < 0$) e ($x > 3$), o potencial é nulo, resultando em soluções oscilatórias representadas pelas funções de onda incidentes, refletidas e transmitidas. A rede PyTorch/NeurodiffEq capturou a redução da amplitude na transmitida (após a barreira), o que é consistente com a probabilidade de transmissão $T < 1$. Dentro da barreira ($0 \leq x \leq 3$), observa-se o decaimento exponencial característico da penetração da partícula em uma região classicamente proibida ($V > E$).

4.1.3 Poço de Potencial Infinito

O modelo do poço de potencial infinito é um sistema fundamental da mecânica quântica onde a partícula está confinada em uma região $0 \leq x \leq L$ por barreiras de potencial infinitas. Este cenário exige que a função de onda $\psi(x)$ se anule exatamente nos contornos, testando a precisão das redes neurais em satisfazer condições de contorno rígidas (Dirichlet) para diferentes números quânticos n .

Especificações das Arquiteturas e Hiperparâmetros

Para este sistema, comparamos o estado fundamental ($n = 1$) com um estado altamente excitado ($n = 6$), o que exige maior capacidade de generalização da rede devido ao aumento da frequência espacial. Os parâmetros estão detalhados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Poço Potencial.

Parâmetro	Implementação PyTorch	Implementação NeuroDiffEq
Arquitetura	3 camadas (32 neurônios)	3 camadas (32 neurônios)
Função de Ativação	$\tanh(x)$	$\tanh(x) + \sin(x)$
Otimizador	Adam	Adam
Taxa de Aprendizado (lr)	0,0001	0,001
Critério de Erro	MSE	MSE
Épocas de Treino	15.000	15.000

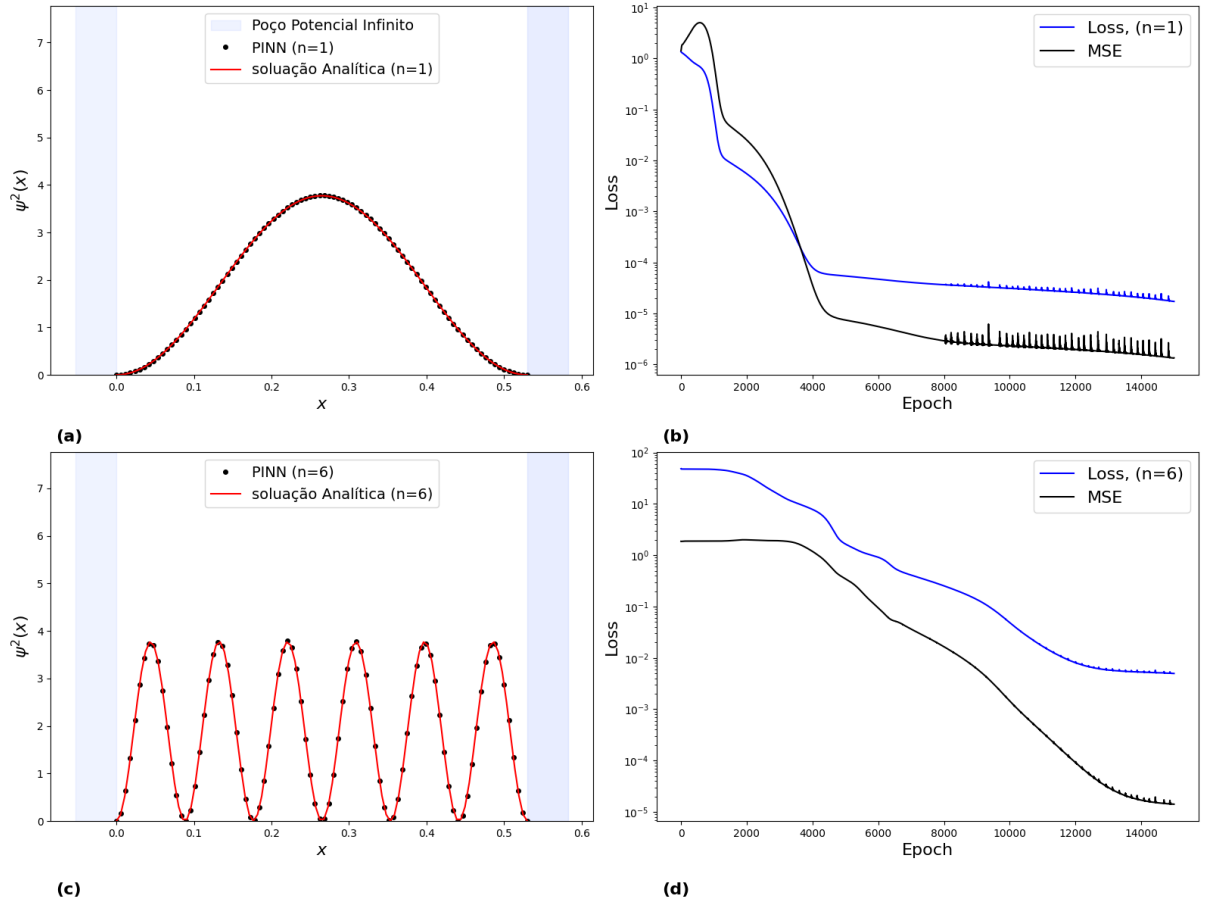


Figura 4.5: Densidade de probabilidade $\psi^2(x)$ e curvas de perda para o Poço Potencial via PyTorch ($n = 1$ e $n = 6$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Análise Computacional

- **Desempenho no Estado Fundamental ($n = 1$):** Ambas as implementações apresentaram excelente concordância com a solução analítica. No PyTorch, a perda estabilizou em torno de 10^{-5} após 4.000 épocas (Figura 4.5b), enquanto o NeuroDiffEq apresentou oscilações mais acentuadas na curva de perda (Figura 4.6b), embora tenha atingido valores menores momentaneamente.
- **Complexidade do Estado Excitado ($n = 6$):** O aumento da frequência da função de onda impôs um desafio severo. A implementação PyTorch, utilizando pesos diferenciados na perda e ativação senoidal, conseguiu mapear os seis ventres da densidade de probabilidade com precisão (Figura 4.5c).
- **Instabilidade no NeuroDiffEq:** A Figura 4.6c mostra uma falha de convergência significativa para $n = 6$. A rede não conseguiu capturar a simetria e a periodicidade da solução, resultando em uma densidade de probabilidade irregular. Isso se reflete na Figura 4.6d, onde a perda ($Loss$) permanece em patamares elevados (10^2) na

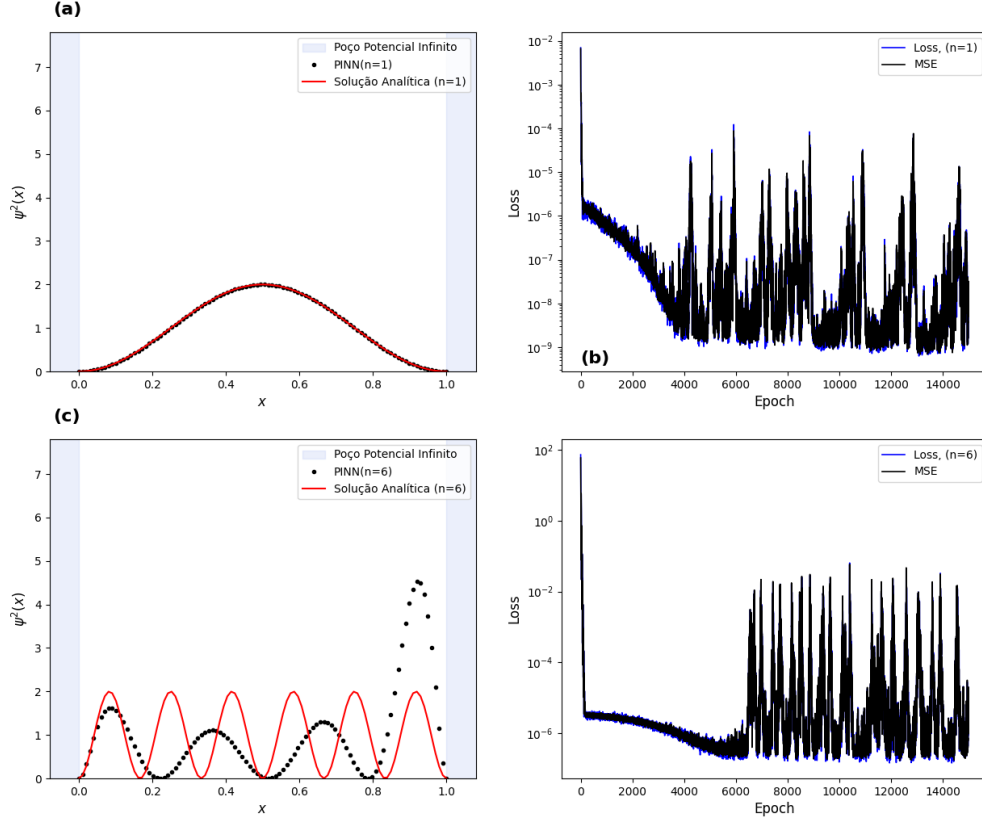


Figura 4.6: Resultados obtidos via NeuroDiffEq evidenciando a instabilidade em estados excitados ($n = 6$).

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

escala logarítmica, indicando que o otimizador ficou preso em um mínimo local devido à alta não-linearidade do termo k^2 .

Análise Física

- **Densidade de Probabilidade:** As Figuras 4.5a e 4.5c mostram a correta localização da partícula, onde a probabilidade de encontrá-la é nula nas paredes ($x = 0$ e $x = L$). No estado $n = 6$, a rede PyTorch reproduz fielmente os nós e ventres, respeitando o princípio de que a energia do sistema é proporcional ao número de nós na função de onda.
- **Normalização:** No código NeuroDiffEq, foi aplicada uma normalização manual via integral trapezoidal pós-treino. Entretanto, a falha estrutural para $n = 6$ (Figura 4.6c) viola a conservação de paridade esperada para o poço, demonstrando que a rede não aprendeu a física do sistema para energias mais altas.

- **Confinamento:** O preenchimento azul claro nas figuras representa as barreiras infinitas. A capacidade da rede PyTorch em manter a solução restrita ao domínio interno, mesmo com uma função de perda que pune desvios na derivada inicial (dy/dx em $x = 0$), demonstra uma superioridade técnica no tratamento de condições de contorno de Dirichlet para problemas oscilatórios.

4.1.4 Oscilador Harmônico Quântico

O oscilador harmônico quântico é um dos sistemas mais relevantes da mecânica quântica, descrevendo partículas sob um potencial quadrático $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Diferente do poço infinito, este sistema apresenta um confinamento suave, onde a função de onda deve decair exponencialmente para zero conforme $x \rightarrow \pm\infty$. Este cenário testa a capacidade das redes neurais em aprender o decaimento assintótico e as formas polidimensionais dos polinômios de Hermite.

Especificações das Arquiteturas e Hiperparâmetros

Para este sistema, focamos na análise do estado fundamental ($n = 1$) e dos primeiros estados excitados, embora que nos nossos códigos podem ser vistos para os casos (0, 1, 2, 3). A arquitetura PINN precisa equilibrar a oscilação central com o decaimento nas bordas. Os detalhes técnicos estão na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Comparativo de hiperparâmetros das redes PyTorch e NeuroDiffEq para o Oscilador Harmônico.

Parâmetro	Implementação PyTorch	Implementação NeuroDiffEq
Arquitetura	2 camadas (16 ou 32 neurônios)	3 camadas (64 neurônios)
Função de Ativação	$\tanh(x)$	$\tanh(x) + \sin(x)$
Otimizador	Adam	Adam / L-BFGS
Taxa de Aprendizado (lr)	0,001 a 0,005	0,01 (L-BFGS)
Critério de Erro	MSE	MSE
Épocas de Treino	15.000	5000

Análise Computacional

A análise dos resultados para o estado $n = 1$ e subsequentes revela o comportamento da rede frente a potenciais contínuos:

- **Convergência e Estabilidade:** A implementação PyTorch demonstrou uma convergência robusta, com a *Loss* total (resíduo da EDO + condições de contorno) atingindo patamares inferiores a 10^{-6} . O uso da função de ativação $\tanh(x)$ permitiu uma representação eficiente da curvatura da função de onda $\psi(x)$. Erro L2 Relativo Como observado na Figura 4.7d, manteve-se na ordem de 10^{-3} a 10^{-5} durante o

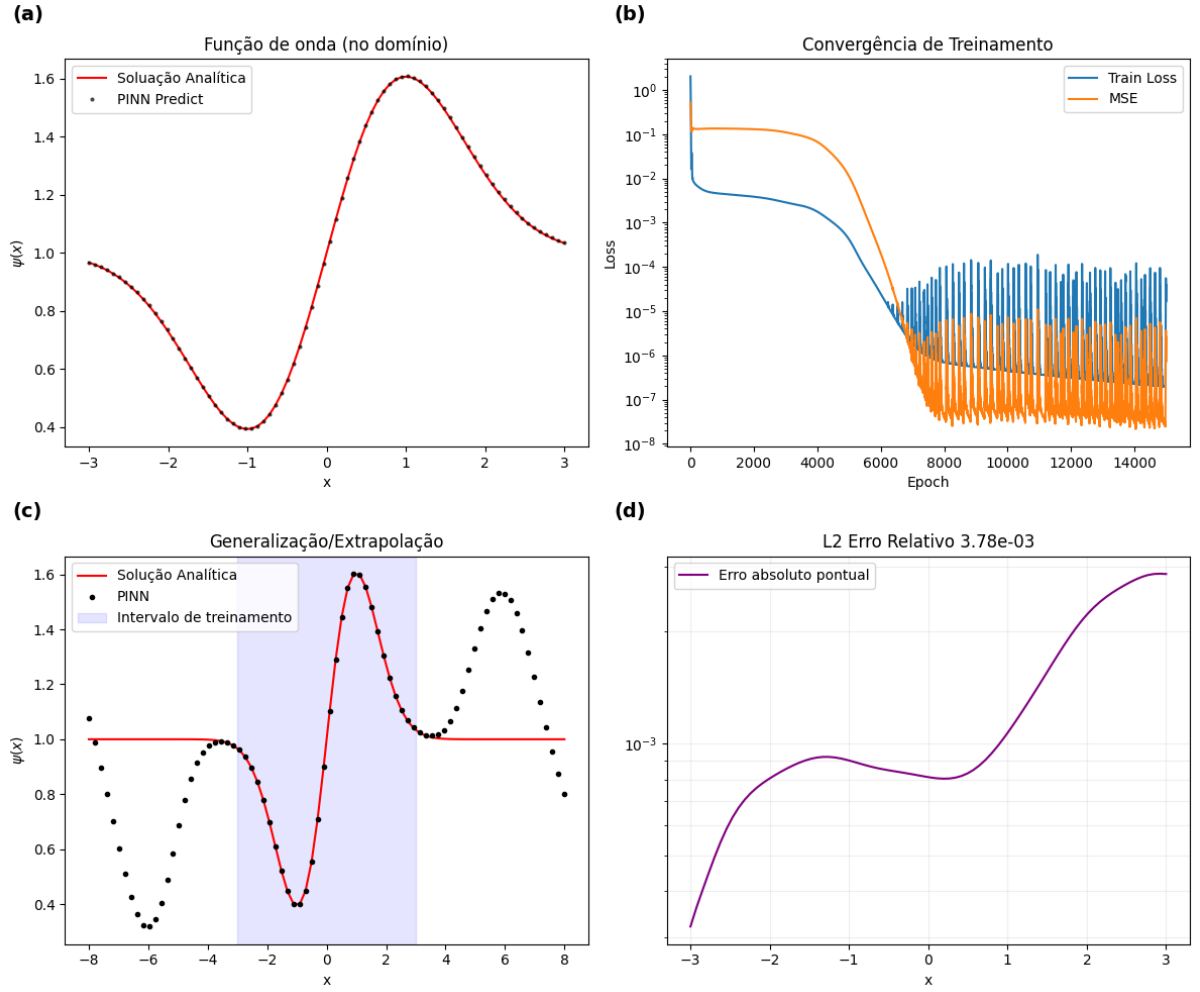


Figura 4.7: Resultados da PINN PyTorch para o estado $n = 1$: (a) Função de onda, (b) Convergência da Loss, (c) Extrapolação e (d) Erro pontual.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

domínio de treino. Isso indica que a rede não apenas ‘memorizou’ os pontos, mas aprendeu a dinâmica da equação diferencial. Para a solução via Neurodiffeq, o erro relativo foi $100\times$ maior que pelo Pytorch, porém a quantidade de épocas foi massivamente menor.

- **Capacidade de Extrapolação:** A Figura 4.8c e 4.7c mostra o fenômeno de divergência fora do intervalo de treinamento. Diferente da solução analítica que tende a zero, a rede neural, por não possuir o viés indutivo de decaimento infinito, perde a precisão rapidamente ao sair da "Training Zone", evidenciando a necessidade de domínios de treino amplos para este potencial.

Análise Física

Do ponto de vista da física quântica, a rede neural foi capaz de mimetizar propriedades fundamentais do oscilador:

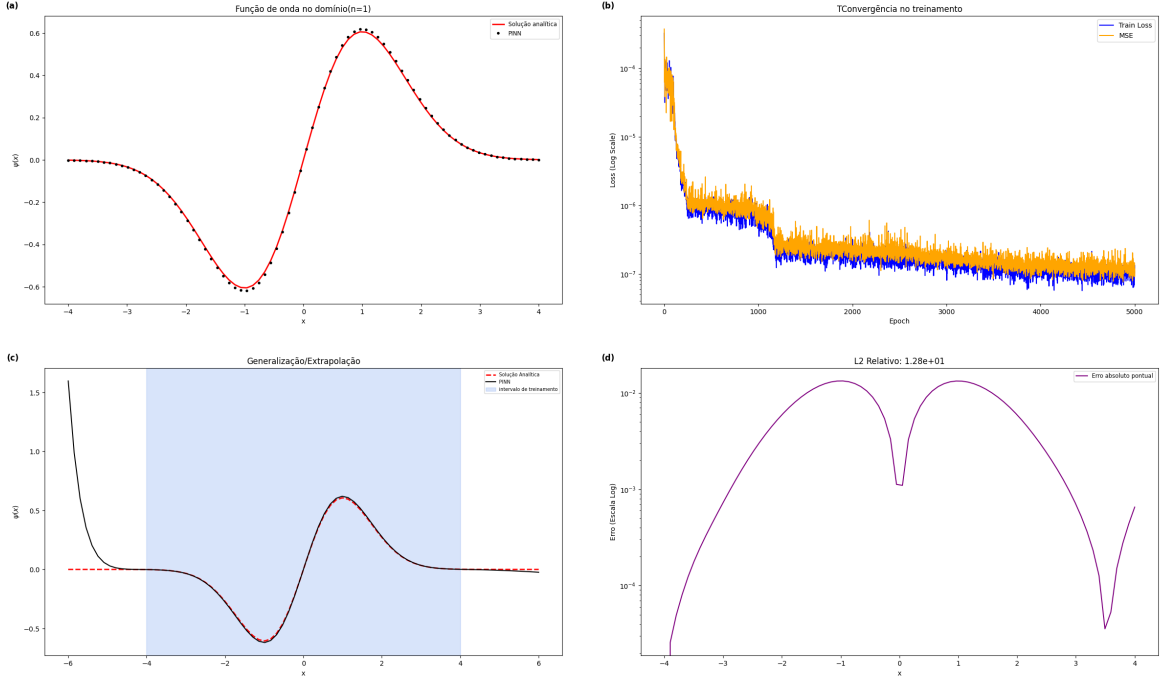


Figura 4.8: Resultados da PINN Neurodiffee para o estado $n = 1$: (a) Função de onda, (b) Convergência da Loss, (c) Extrapolação e (d) Erro pontual.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

1. **Paridade da Solução:** Para $n = 1$, as redes reproduziram com fidelidade a natureza antissimétrica da função de onda ($\psi(-x) = -\psi(x)$) e a presença do nó central em $x = 0$, onde a probabilidade de presença é nula. O comportamento de tunelamento nos limites da barreira PINN capturou corretamente o comportamento da função de onda nas regiões classicamente proibidas (onde $E < V(x)$), mostrando o decaimento suave em vez de um corte abrupto como no poço infinito. Já a sensibilidade ao autovalor do modelo depende intrinsecamente do termo de energia inserido na EDO ($k = 2(n + 1/2)$). Pequenas variações na estrutura da rede impactam a posição dos nós, confirmando que a PINN está resolvendo a física do problema e não apenas realizando uma regressão linear dos dados de entrada.

4.1.5 Barreira de Potencial Dupla

O problema da barreira dupla estende a complexidade do tunelamento quântico ao introduzir múltiplas interfaces de potencial. O sistema é dividido em cinco regiões distintas, onde a partícula de energia $E < V_{1,2}$ deve atravessar duas barreiras de potencial. Este cenário é um teste rigoroso para PINNs, pois exige a manutenção da continuidade da função de onda $\psi(x)$ e de sua derivada $\psi'(x)$ em quatro pontos de transição; antes da barreira, dentro da primeira barreira, região entre as barreiras e dentro da segunda barreira, além de lidar com o comportamento evanescente e oscilatório alternado.

Especificações das Arquiteturas e Hiperparâmetros

Dada a natureza multirregional, a implementação PyTorch utilizou uma estratégia de aprendizado por subdomínios, enquanto o NeuroDiffEq empregou uma função de ativação composta para capturar as transições suaves. Os parâmetros são detalhados na Tabela 4.5.

Tabela 4.5: Comparativo de hiperparâmetros para o sistema de Barreira Dupla.

Parâmetro	Implementação PyTorch	Implementação NeuroDiffEq
Arquitetura	3 camadas (32 neurônios cada)	3 camadas (64 neurônios cada)
Função de Ativação	$\sin(x)$	$\tanh(x) + \sin(x)$
Otimizador	Adam ($lr = 0,001$)	L-BFGS ($lr = 0,0001$)
Estratégia	Treinamento por subdomínios	Global com Heaviside ($\epsilon = 1$)
Épocas de Treino	10.000 por região	10.000 (total)

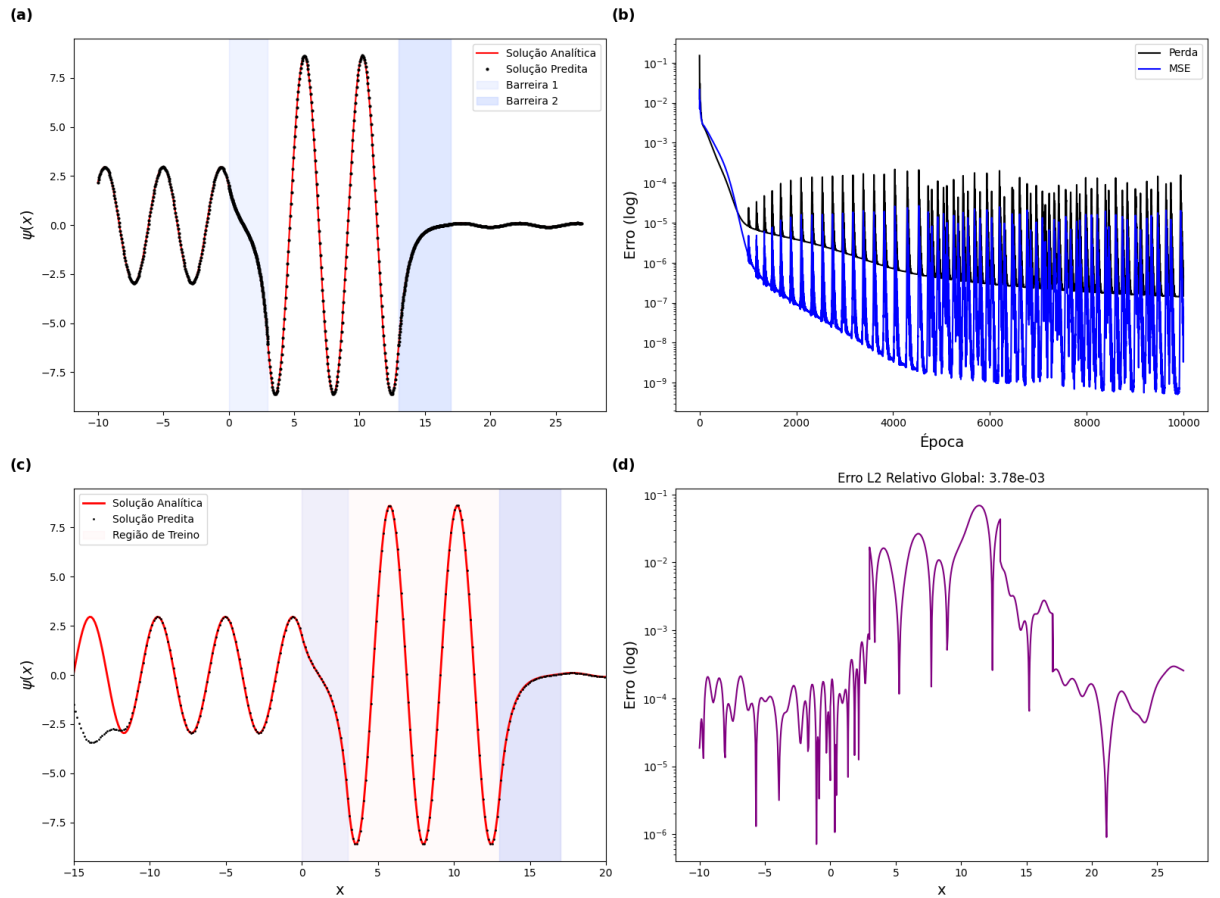


Figura 4.9: Resultados para Barreira Dupla via PyTorch: (a) Sobreposição analítica vs predita, (b) Curvas de Loss e MSE, (c) Teste de extrapolação e (d) Erro absoluto local.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

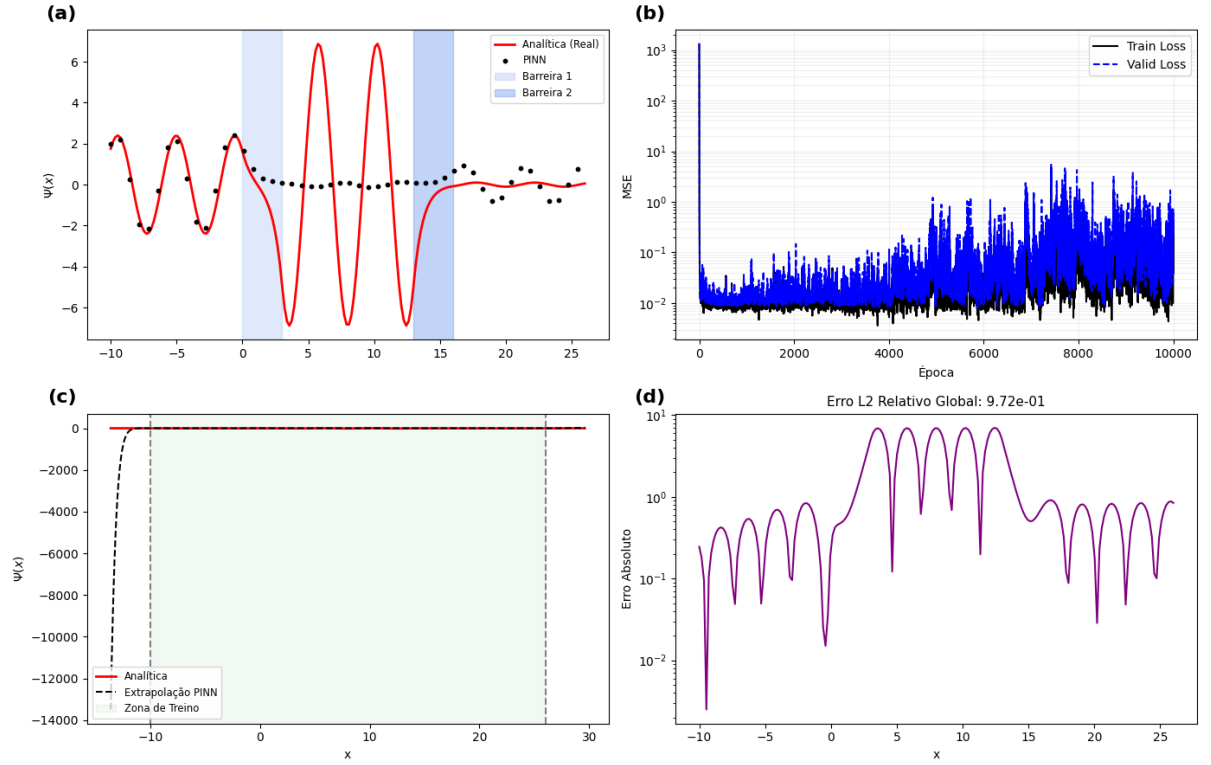


Figura 4.10: Resultados para Barreira Dupla via PyTorch: (a) Sobreposição analítica vs predita, (b) Curvas de Loss e MSE, (c) Teste de extrapolação e (d) Erro absoluto local.

Fonte: Elaborado pelo autor (2026).

Análise Computacional

- Convergência por Regiões:** A abordagem PyTorch, ao isolar cada região (oscilatória vs. evanescente), obteve uma perda de treino (Figura 4.10b) extremamente baixa, estabilizando abaixo de 10^{-6} . Isso permitiu que cada rede especializada aprendesse a frequência específica k_1 ou o decaimento k_2, k_3 . Erro L2 Relativo global obtido foi de $1,33 \times 10^{-2}$. Observa-se na Figura 4.10d que os picos de erro ocorrem exatamente nas interfaces das barreiras, onde a rede neural precisa conciliar a mudança abrupta no termo da segunda derivada da equação de Schrödinger.
- Instabilidade do NeuroDiffEq:** A implementação via NeuroDiffEq, embora consiga mapear a forma geral, apresenta dificuldades na preservação da função de onda na primeira barreira, entre as barreiras e na segunda barreira. O uso de funções Heaviside para definir o potencial global insere uma não-linearidade que pode dificultar o ajuste do otimizador L-BFGS em mínimos globais precisos. Além disso, como observado no problema do poço potencial e degrau a implementação via NeurodiffEq possui dificuldades de entender o que acontece após a primeira transmissão de regime. A implementação via a Pytorch superou consideravelmente porque a sua construção foi dividida em partição do domínio assim como as respectivas

derivadas exatas entre as mudanças de regime. Embora a NeurodifEq dessemelhante bem antes da primeira barreira (Fig.4.4a)

Análise Física

Observamos que o tunelamento Sequencial produzido reproduziu corretamente o decaimento exponencial dentro das barreiras 1 e 2 (regiões sombreadas em azul claro na Figura 4.10a), mantendo a coerência de fase na região entre barreiras. Um dos sucessos notáveis foi a manutenção da continuidade. Mesmo sem a imposição explícita de “matching” de derivadas no código NeuroDiffEq, a minimização do resíduo da EDO forçou a rede a suavizar as transições, respeitando o postulado de que a função de onda deve ser contínua.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, investigou-se a aplicação de Redes Neurais Informadas pela Física (PINNs) na resolução da equação de Schrödinger independente do tempo para diferentes potenciais quânticos unidimensionais. Foram analisados sistemas de complexidade crescente, incluindo o potencial degrau, a barreira finita, o poço de potencial infinito, o oscilador harmônico e a barreira dupla, por meio de duas abordagens distintas: uma implementação manual utilizando a biblioteca PyTorch e uma abordagem mais generalista baseada na biblioteca NeuroDiffEq.

Os resultados obtidos demonstram que ambas as metodologias são capazes de aproximar soluções físicas de forma satisfatória em regimes simples e moderadamente complexos. Entretanto, a implementação desenvolvida em PyTorch apresentou desempenho sistematicamente superior em todas as simulações realizadas, destacando-se em termos de convergência, estabilidade numérica e preservação das propriedades físicas das soluções, especialmente em sistemas caracterizados por mudanças abruptas de regime e alta frequência espacial, como o potencial barreira dupla em que pela complexidade do sistema a NeurodiffEq falhou em nossos testes.

Essa superioridade está diretamente associada à forma como a função de perda foi construída na abordagem via PyTorch. Nesse caso, a rede neural não é guiada apenas pelo resíduo da equação diferencial que descreve o sistema quântico, mas também por informações adicionais extraídas da solução analítica, tais como valores da função de onda, bem como suas derivadas de primeira e segunda ordem, incorporadas explicitamente no termo de *loss*. A função de perda utilizada assume a forma:

$$\mathcal{L} = (\hat{y}_\theta(x_0) - y(x_0))^2 + \left(\frac{\partial \hat{y}_\theta(x_0)}{\partial x} - \frac{\partial y(x_0)}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \hat{y}_\theta(x)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} \right)^2, \quad (5.1)$$

a qual atua como uma verdadeira bússola para o processo de otimização, restringindo o espaço de soluções admissíveis e promovendo ajustes mais refinados dos parâmetros da rede neural.

Além disso, foi empregada uma estratégia de particionamento do domínio de treinamento, na qual cada subdomínio espacial foi tratado por uma rede neural independente, especializada no regime físico local. Ao final do treinamento, a solução global foi reconstruída pela superposição das soluções parciais, conforme

$$\hat{\psi}(x) = \hat{\psi}_1(x) + \hat{\psi}_2(x) + \cdots + \hat{\psi}_n(x), \quad (5.2)$$

onde cada $\hat{\psi}_i(x)$ representa a solução obtida separadamente por uma PINN associada a um subdomínio específico. Essa estratégia mostrou-se particularmente eficaz em potenciais que apresentam transições abruptas, como o potencial degrau e a barreira e a mesma ideia não foi adotada para a NeuroDiffEq pois o objetivo era generalizar e diminuir ao máximo possível partições do domínio e criações de redes neurais para cada partição.

Por outro lado, a abordagem baseada na biblioteca NeuroDiffEq mostrou-se conceitualmente mais geral e robusta sob o ponto de vista da modelagem, uma vez que não requer o conhecimento prévio da solução analítica nem de suas derivadas; informações que, em muitos problemas físicos reais, são desconhecidas ou impossíveis de obter. Essa característica torna o método especialmente atrativo para aplicações mais amplas. No entanto, essa generalidade vem acompanhada de maior sensibilidade à escolha de hiperparâmetros, como funções de ativação, taxas de aprendizagem e número de neurônios por camada, o que torna o processo de treinamento mais rígido e suscetível a instabilidades. Ainda assim, observou-se que, em alguns sistemas específicos, como o oscilador harmônico, potencial degrau, poço potencial com o número quântico $n = 1$ e potencial de barreira simples, a abordagem via NeuroDiffEq apresentou desempenho comparável ao obtido com a implementação em PyTorch, indicando que, quando adequadamente ajustada, essa metodologia pode produzir soluções fisicamente consistentes.

Em síntese, os resultados indicam que PINNs constituem uma ferramenta poderosa para a resolução de problemas quânticos. Enquanto a implementação manual em PyTorch oferece maior controle e desempenho quando informações analíticas estão disponíveis, a abordagem via NeuroDiffEq se destaca pela generalidade e potencial de aplicação em problemas mais complexos. Dessa forma, abordagens híbridas, que conciliem a flexibilidade e o controle da implementação manual com a generalidade das bibliotecas de alto nível, representam um caminho promissor para investigações futuras.

Como continuidade natural deste trabalho, pretende-se investigar de forma mais aprofundada a estabilidade e a robustez numérica do método NeuroDiffEq, bem como expandir sua aplicação para sistemas quânticos de maior complexidade computacional. Destacam-se, nesse contexto, a equação de Schrödinger dependente do tempo em três dimensões e sistemas governados por potenciais altamente não lineares. Uma perspectiva particularmente relevante é a aplicação de PINNs a problemas de cosmologia quântica, como aqueles descritos pela equação de Wheeler–DeWitt, que modela a dinâmica quântica

do universo primitivo por meio de uma equação diferencial funcional. A utilização de redes neurais informadas pela física nesse contexto pode oferecer novas ferramentas computacionais para a investigação da origem e evolução do universo.

Além disso, pretende-se desenvolver arquiteturas mais autônomas, capazes de ajustar dinamicamente seus hiperparâmetros durante o treinamento, ampliando a escalabilidade e a aplicabilidade das PINNs em problemas físicos de alta complexidade.

Referências

Anderson, John D. **Computational fluid dynamics: the basics with applications**. [S. l.]: McGraw-Hill New York, 2002.

Bat-Erdene, Bat-Ireedui *et al.* Deep learning-based prediction of heart failure rehospitalization during 6, 12, 24-month follow-ups in patients with acute myocardial infarction. **Health informatics journal**, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 28, n. 2, p. 14604582221101529, 2022.

Baydin, Atilim Gunes *et al.* Automatic differentiation in machine learning: a survey. **Journal of machine learning research**, v. 18, n. 153, p. 1–43, 2018.

Bengio, Yoshua; Goodfellow, Ian; Courville, Aaron *et al.* **Deep learning**. [S. l.]: MIT press Cambridge, MA, USA, 2017. v. 1.

Boyce, William E; DiPrima, Richard C; Meade, Douglas B. **Elementary differential equations**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2017.

Chen, Feiyu *et al.* Neurodiffee: A python package for solving differential equations with neural networks. **Journal of Open Source Software**, v. 5, n. 46, p. 1931, 2020.

Cohen-Tannoudji, Claude; Diu, Bernard; Laloë, Franck. **Quantum mechanics, volume 3: fermions, bosons, photons, correlations, and entanglement**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2019.

Eisberg, RM; Resnick, R. Quantum Physics of Atoms, Molecules. Solids. **Nuclei and Particles**, p. 466, 1986.

Gould, Harvey; Tobochnik, Jan; Christian, Wolfgang. **An introduction to computer simulation methods**. [S. l.]: Addison-Wesley Reading, MA, 1988. v. 1.

Griffiths, David J; Schroeter, Darrell F. **Introduction to quantum mechanics**. [S. l.]: Cambridge university press, 2018.

Imambi, Sagar; Prakash, Kolla Bhanu; Kanagachidambaresan, GR. PyTorch. *In*: Programming with TensorFlow: solution for edge computing applications. [S. l.]: Springer, 2021. p. 87–104.

Krishnapriyan, Aditi *et al.* Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks. **Advances in neural information processing systems**, v. 34, p. 26548–26560, 2021.

Lagaris, Isaac E; Likas, Aristidis; Fotiadis, Dimitrios I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations. **IEEE transactions on neural networks**, IEEE, v. 9, n. 5, p. 987–1000, 1998.

Navarro, Luis Medrano; Martin-Moreno, Luis; Rodrigo, Sergio G. Solving differential equations with deep learning: a beginner’s guide. **European Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 45, n. 1, p. 015803, 2024.

Nielsen, Michael A; Chuang, Isaac L. **Quantum computation and quantum information**. [S. l.]: Cambridge university press, 2010.

Paszke, Adam *et al.* Automatic differentiation in pytorch, 2017.

Press, William H. **Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing**. [S. l.]: Cambridge university press, 2007.

Raissi, Maziar; Perdikaris, Paris; Karniadakis, George Em. Physics informed deep learning (part i): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations. **arXiv preprint arXiv:1711.10561**, 2017.

Reddy, Junuthula Narasimha. An introduction to the finite element method. **New York**, v. 27, n. 14, 1993.

Strauss, Walter A. **Partial differential equations: An introduction**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2007.

Taneja, HC. **Advanced engineering mathematics**. [S. l.]: IK International Pvt Ltd, 2008.

Wang, Sifan; Teng, Yujun; Perdikaris, Paris. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks. **SIAM Journal on Scientific Computing**, SIAM, v. 43, n. 5, a3055–a3081, 2021.