

EXTENSIÓN DEL ESQUEMA DE INTEGRADORES SIMPLÉCTICOS EN EL MÉTODO PSEUDO-ESPECTRAL

Diego Sanjinés C.¹

Carrera de Física, U.M.S.A.

RESUMEN

Se presenta una generalización del esquema de operadores simplécticos en el método pseudo-espectral. Ya en trabajos anteriores [1], se utilizó la aproximación de segundo orden de este esquema y con ello se verificó analíticamente el fenómeno físico de la oscilación de Bloch. Surge entonces la cuestión de saber si este fenómeno es “sensible” al orden del integrador simpléctico elegido para simular numéricamente la dinámica de un electrón cristalino de enlace fuerte en un campo eléctrico estático y homogéneo. El resultado de este trabajo muestra que el periodo de la oscilación de Bloch, y probablemente todos los aspectos físicos relevantes de dicha dinámica, no dependen del orden del integrador.

1. INTRODUCCIÓN

El problema de representar la dinámica de un electrón en presencia de un campo eléctrico externo estático corresponde —como es sabido [2]— al cálculo de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ como solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, junto con las variables dinámicas que dependen de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ como ser los valores medios de posición, velocidad y ancho del paquete de ondas electrónico. La expresión formal de dicha solución es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iH(t-t_0)} \Psi(\mathbf{r}, t_0) \quad (1)$$

donde $H = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r})$ es el hamiltoniano independiente del tiempo. Ya que los operadores de energía cinética $T(\mathbf{p})$ y energía potencial $V(\mathbf{r})$ en general no conmutan, el desarrollo del operador de evolución temporal $\exp(-iH(t-t_0))$ en (1) tendrá un resultado no-trivial al actuar sobre un estado inicial $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, que —para el caso de un típico electrón cristalino— se puede tomar como un paquete gaussiano definido en una red. Las unidades físicas que se usará en este trabajo son aquellas denominadas “atómicas” (ver, por ejemplo, Yoshida [3]) donde $\hbar = 1$, M (masa del electrón) = 1, e (carga del electrón) = 1 y a (constante de red) = 1.

Así, en la mayoría de los esquemas numéricos para simular la dinámica de un electrón cristalino [4], se busca separar el operador de evolución en (1) de forma aproximada, de manera tal que para $t = t_1$ y $t_1 - t_0 = \Delta t$, la aplicación iterativa de (1) permita obtener el estado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para un instante arbitrario $t = N\Delta t$ hasta un orden de aproximación $O(\Delta t^{n+1})$, donde n es un entero positivo. El esquema formal que permite dicha separación es el esquema de integradores simplécticos para sistemas hamiltonianos [3], y se puede describir como:

Para los operadores no-conmutativos T y V , el número real pequeño Δt y el entero positivo n (denominado *orden del integrador*, existen dos conjuntos de números reales $\{c_1, c_2, \dots, c_k\}$ y $\{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ tales que se cumple

$$e^{-i(V+T)\Delta t} = \prod_{m=1}^k e^{-ic_m V \Delta t} e^{-id_m T \Delta t} + O(\Delta t^{n+1}), \quad (2)$$

donde

$$\sum_{m=1}^k c_m = \sum_{m=1}^k d_m = 1. \quad (3)$$

Una condición física que debe cumplir el esquema descrito por (2) es la reversibilidad temporal, esto es,

$$e^{-iH\Delta t} e^{-iH(-\Delta t)} = e^{-iH(-\Delta t)} e^{-iH\Delta t} = 1, \quad (4)$$

lo que restringe el esquema en cuestión a integradores simplécticos de orden par [3]; sin embargo, el caso de $n = 3$ se considerará más adelante solamente para efectos ilustrativos.

El caso trivial de (2) corresponde a $n = k = 1$, con $c_1 = d_1 = 1$. Para $n = k = 2$ se encuentra $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ y $d_2 = 0$. En general, para valores de $n > 2$ (integradores simplécticos de orden superior) se encuentra los conjuntos $\{c_1, c_2, \dots, c_k\}$ y $\{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ a través de aplicar a (2) la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [5]. Así, para $n = k = 4$, Yoshida y otros antes que él [3] obtuvieron los siguientes coeficientes (que aquí se escriben de forma aproximada):

$$c_1 = c_4 \cong 0.676, \quad c_2 = c_3 \cong -0.176, \\ d_1 = d_3 \cong 1.351, \quad d_2 \cong -1.702 \quad \text{y} \quad d_4 = 0. \quad (5)$$

¹Email: sanjines@fiums.a.edu.bo

La separación de acuerdo a (2) para $n = k = 2$ es particularmente útil en el contexto del método pseudo-espectral aplicado al estudio (en una dimensión) de la dinámica electrónica de enlace fuerte (*tight-binding*) en presencia de un campo eléctrico homogéneo y estático [1], pues de ello resulta la fórmula iterativa de evolución infinitesimal

$$C_m^{p+1} = \sum_n C_n^p e^{-i\alpha(n+m)\lambda} i^{n-m} J_{n-m}(z) + O(\Delta t^3), \quad (6)$$

donde los coeficientes $C_n^p \equiv C_n(p\Delta t)$ describen al estado cristalino $\Psi(x = na, t)$ en la representación de las funciones Wannier $\Phi(x - ma)$:

$$\Psi(x = na, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m(t) \Phi(x - ma). \quad (7)$$

En (6) se tiene $z = 2A\Delta t = 4A\lambda$, con A el elemento de salto (*hopping*) entre sitios vecinos de una red cristalina separados por una constante de red unitaria $a = 1$; la energía potencial correspondiente al campo eléctrico homogéneo de intensidad α es $V_n = \alpha n$ y J_m es la función de Bessel de primer tipo y orden entero m . La solución analítica de (6) representada por C_n^N para un instante arbitrario $t = N\Delta t$ ya se conoce (cf. ec. (23) abajo) y se discutió ampliamente en otros trabajos [1]; en el límite de $N \rightarrow \infty$ esta solución permite describir el fenómeno físico de la oscilación de Bloch con un periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$.

2. EXTENSIÓN DEL ESQUEMA DE INTEGRADORES SIMPLÉCTICOS

La cuestión natural que surge a continuación es saber cómo, a través de (2), una mayor “segmentación” del operador de evolución puede incorporarse en el método pseudo-espectral, es decir, para integradores simplécticos de orden mayor ($n = 4, 6, 8, \dots$), ¿cuál es la correspondiente fórmula iterativa de evolución infinitesimal? ¿Cuál es la solución general de dicha fórmula? ¿Cómo depende el fenómeno físico de la oscilación de Bloch del orden del integrador n en (2)? Seguramente que la respuesta a esta última pregunta es “no”, pues la oscilación de Bloch, como fenómeno físico, debe depender solamente de la estructura del hamiltoniano H en (2), sin importar cuál sea su segmentación aproximada. La veracidad de esta afirmación debe reflejarse en el análisis que se presentará a continuación.

La respuesta a la primera pregunta está dada por la fórmula (8) a continuación, y resulta (ver [1] y referencias allí citadas) de una extensión natural de los pasos que llevaron del esquema de integradores simplécticos dado por (2) a la fórmula pseudo-espectral (6); así, para el integrador simpléctico de orden n se tiene:

$$C_{n_k}^{p+1} = \sum_{n_1, \dots, n_{k-1}} C_{n_1}^p \prod_{m=1}^k \exp(-ic_m V_{n_m} \Delta t) \times F(n_m - n_{m+1}, d_m) + O(\Delta t^{n+1}), \quad (8)$$

donde $d_k = 0$, $n_{k+1} = n_k$ y, para el caso de la banda de enlace fuerte $T(k) = -2A \cos k$, de tal forma que

$$F(n_m - n_{m+1}, d_m) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[k(n_m - n_{m+1})] \times \exp(2id_m A \Delta t \cos k) dk; \quad (9)$$

esta última integral en (7) se puede expresar en términos de la función de Bessel del primer tipo y orden entero, así que (8) se escribe finalmente como

$$C_{n_k}^{p+1} = \sum_{n_1, \dots, n_{k-1}} C_{n_1}^p \prod_{m=1}^k e^{-ic_m n_m \alpha \Delta t} i^{n_m - n_{m+1}} \times J_{n_m - n_{m+1}}(2d_m A \Delta t) + O(\Delta t^{n+1}). \quad (10)$$

Siguiendo el esquema de integradores simplécticos sugerido por Yoshida [3] la relación entre el orden del integrador n y el índice k en la multiplicatoria de (10) es $n = k$ hasta $n = 4$; sin embargo, para integradores de orden superior ($n > 4$) dicha relación ya no se cumple necesariamente. Se puede ver que la fórmula (6) corresponde al caso de (10) con $n = k = 2$, $d_2 = 0$, $n_3 = n_2$ y los coeficientes $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ y $d_2 = 0$ (recordemos que $J_0(0) = 1$). El siguiente paso lógico es tomar $n = k = 3$, $d_3 = 0$ y $n_4 = n_3$ en (10), cuyo desarrollo es:

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1}^p \times e^{-ic_1 n_1 \alpha \Delta t} i^{n_1 - n_2} J_{n_1 - n_2}(2d_1 A \Delta t) \times e^{-ic_2 n_2 \alpha \Delta t} i^{n_2 - n_3} J_{n_2 - n_3}(2d_2 A \Delta t) \times e^{-ic_3 n_3 \alpha \Delta t} i^{n_3 - n_4} J_{n_3 - n_4}(2d_3 A \Delta t) + O(\Delta t^4), \quad (11)$$

que se puede reacomodar como

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1} C_{n_1}^p e^{-i(c_1 n_1 + c_3 n_3) \alpha \Delta t} i^{n_1 - n_3} \times \sum_{n_2} e^{-i(c_2 n_2) \alpha \Delta t} J_{n_1 - n_2}(2d_1 A \Delta t) \times J_{n_2 - n_3}(2d_2 A \Delta t) + O(\Delta t^4), \quad (12)$$

de tal forma que la suma sobre n_2 (que se designará como Γ) se pueda calcular de acuerdo a la fórmula de adición de Graf [6]. El resultado es:

$$\Gamma = J_{n_1 - n_3}(\tau_{p+1}) e^{-i(n_3 - n_1) \chi_p + n_1 c_2 \alpha \Delta t}, \quad (13)$$

donde

$$\chi_p = \arctan \left[\frac{\sin(c_2 \alpha \Delta t)}{d_2/d_1 + \cos(c_2 \alpha \Delta t)} \right], \quad (14)$$

$$\tau_{p+1} = \tau_1 \frac{\sin(c_2 \alpha \Delta t)}{\sin(\chi_p)}, \quad (15)$$

y $\tau_1 = 2d_1 A \Delta t$. Una aproximación útil —aunque poco precisa— para (14) y (15) es $\chi_p \cong c_2 \alpha \Delta t / (d_2/d_1 + 1)$ y $\tau_{p+1} \cong \tau_1 (d_2/d_1 + 1)$ respectivamente, con lo que Γ en (13) se puede escribir como

$$\Gamma \cong J_{n_1 - n_3}(\tau_1 (d_2/d_1 + 1)) \times \exp \left[-ic_2 \alpha \Delta t \left(\frac{n_3 d_1 + n_1 d_2}{d_1 + d_2} \right) \right], \quad (16)$$

de tal manera que (12) queda como

$$C_m^{p+1} \cong \sum_n C_n^p e^{-i(A_n+B_m)\alpha\Delta t} i^{n-m} \times J_{n-m}(2A\Delta t), \quad (17)$$

donde se invocó la fórmula (3) y se definió $\mathcal{A} = c_1 + c_2d_2$ y $\mathcal{B} = c_3 + c_2d_1$. Notemos que la fórmula (17) —aunque expresada con menor precisión que (12)— tiene la misma estructura matemática que (6) y, además, en vista de (3), se cumple que $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$.

El caso que acabamos de ver corresponde al integrador simpléctico de tercer orden, es decir, $n = k = 3$ en (2), pero ya se dijo a continuación de (4) que este caso no obedece el requisito físico de reversibilidad temporal. Así pues, antes de sacar mayores conclusiones de (17) sobre la extensión del esquema de operadores simplécticos en el método pseudo-espectral, debemos proceder a examinar el caso $n = k = 4$ para el que existe reversibilidad temporal en (2). Esto implica básicamente sustituir $k = 4$, $d_4 = 0$ y $n_5 = n_4$ en (10), y repetir el conjunto de pasos de (11) a (17) con las modificaciones apropiadas:

$$C_{n_3}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2, n_3} C_{n_1}^p \times e^{-ic_1n_1\alpha\Delta t} i^{n_1-n_2} J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) \times e^{-ic_2n_2\alpha\Delta t} i^{n_2-n_3} J_{n_2-n_3}(2d_2A\Delta t) \times e^{-ic_3n_3\alpha\Delta t} i^{n_3-n_4} J_{n_3-n_4}(2d_3A\Delta t) \times e^{-ic_4n_4\alpha\Delta t} i^{n_4-n_5} J_{n_4-n_5}(2d_4A\Delta t) + O(\Delta t^5), \quad (18)$$

que se reescribe

$$C_{n_4}^{p+1} = \sum_{n_1, n_2} C_{n_1}^p e^{-i(c_1n_1+c_2n_2+c_4n_4)\alpha\Delta t} \times i^{n_1-n_4} J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) \times \sum_{n_3} e^{-ic_3n_3\alpha\Delta t} J_{n_2-n_3}(2d_2A\Delta t) \times J_{n_3-n_4}(2d_3A\Delta t) + O(\Delta t^5), \quad (19)$$

la suma sobre n_3 se realiza por medio de la fórmula de adición de Graf y se aproxima de la misma forma que llevó a (16); el resultado se ordena como

$$C_{n_4}^{p+1} \cong \sum_{n_1} C_{n_1}^p i^{n_1-n_4} \times \exp\left[-i\left(c_1n_1 + c_4n_4 + \frac{c_3d_2n_4}{d_2 + d_3}\right)\alpha\Delta t\right] \times \sum_{n_2} \exp\left[-i\left(c_2 + \frac{c_3d_3n_2}{d_2 + d_3}\right)\alpha\Delta t\right] \times J_{n_1-n_2}(2d_1A\Delta t) J_{n_2-n_4}(2(d_2 + d_3)A\Delta t) \quad (20)$$

y de nuevo, se suma sobre el índice n_2 . El resultado que queda después de simplificaciones es

$$C_{n_4}^{p+1} \cong \sum_{n_1} C_{n_1}^p e^{-i(A_{n_1}+B_{n_4})\alpha\Delta t} i^{n_1-n_4} \times J_{n_1-n_4}(2A\Delta t), \quad (21)$$

donde $\mathcal{A} = c_1 + c_2d_2 + c_2d_3 + c_3d_3$, $\mathcal{B} = c_2 + c_3 + c_4 - c_2d_2 - c_2d_3 - c_3d_3$, verificándose también en este caso que $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$. Debe notarse que este último resultado es *independiente* de los valores específicos de los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_i\}$ en (5) hallados por Yoshida y otros autores [3], permitiendo que un aspecto físico importante como es la oscilación de Bloch, pueda dilucidarse (en el contexto del método pseudo-espectral) sin necesidad de recurrir a los intrincados recursos algebraicos derivados del uso de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [5]. Después de comparar (21) con (17) (para distintos valores de \mathcal{A} y \mathcal{B} en cada caso) ya se puede proponer que

$$C_m^{p+1} \cong \sum_n C_n^p e^{-i(A_n+B_m)\alpha\Delta t} \times i^{n-m} J_{n-m}(2A\Delta t) \quad (22)$$

sea una simplificación adecuada de la fórmula iterativa de evolución infinitesimal (10). Los valores de $\mathcal{A} = \mathcal{A}\{c_i, d_j\}$ y $\mathcal{B} = \mathcal{B}\{c_i, d_j\}$ dependen a su vez de los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ dados por (2). Así, se sugiere que la condición $\mathcal{A} + \mathcal{B} = 1$ se debería cumplir para cualquier orden de integrador simpléctico, conjetura que se verificará más adelante a partir de un requerimiento físico.

Ciertamente, la fórmula (22) ya no tiene la precisión de (10) y por ello es una aproximación muy pobre, sin embargo, su estructura matemática es más sencilla que la de (10): por ejemplo, los coeficientes $\{d_i\}$ ya no se encuentran en el argumento de las funciones de Bessel, sino en la función exponencial. Esto permitirá una gran ventaja en el tratamiento analítico que se muestra a continuación.

La solución general para la ecuación iterativa (6) (que corresponde a $\mathcal{A} = \mathcal{B} = 1/2$) ya se encontró [1] y se demostró por inducción. Esta solución general para el instante arbitrario $t = N\Delta t$ es

$$C_n^N = \sum_r C_r^0 e^{in(\xi_N - \eta_N)} e^{-ir\xi_N} i^{r-n} J_{r-n}(\tau_N), \quad (23)$$

con

$$\tau_N e^{i\xi_N} = \tau_1 e^{i\phi_N} + \tau_{N-1} e^{i\xi_{N-1}}, \quad (24)$$

y

$$\phi_N = (\eta_N + \eta_{N-1})/2, \quad \eta_N = \eta_{N-1} + \alpha\Delta t. \quad (25)$$

A continuación se demostrará por inducción que (23) también es la solución general para (22), con las definiciones equivalentes a (24) y (25) donde se habrá hecho las sustituciones adecuadas. Tomando $N = p$ en (23) y reemplazando en (22):

$$C_m^{p+1} = \sum_r C_r^0 i^{r-m} e^{-ir\xi_p} e^{-i\alpha m \mathcal{B} \Delta t} \times \sum_n e^{-in(\eta_p - \xi_p + \alpha A \Delta t)} J_{n-m}(2A\Delta t) J_{r-n}(\tau_p); \quad (26)$$

luego, se utiliza la fórmula de Graf para sumar sobre el índice n y se define en lugar de (25)

$$\eta_{p+1} = \eta_p + \alpha \Delta t (\mathcal{A} + \mathcal{B}), \quad (27)$$

con lo que se obtiene finalmente

$$C_m^{p+1} = \sum_r C_r^0 e^{im(\xi_{p+1} - \eta_{p+1})} e^{-ir\xi_{p+1}} i^{r-m} J_{r-m}(\tau_{p+1}). \quad (28)$$

Vemos pues que (28) corresponde a (23) con $N = p + 1$. Q.E.D.

Al comparar (27) y la segunda ecuación en (25), se ve que la sustitución adecuada debe ser $\alpha \rightarrow (\mathcal{A} + \mathcal{B})\alpha$ a fin de garantizar que (23), junto con las cantidades ahí comprendidas, es la solución general de la ecuación iterativa infinitesimal (22) para cualquier “segmentación” u orden n del integrador simpléctico en (2). Por otra parte, el periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$ de la oscilación de Bloch para un electrón cristalino en presencia de un campo eléctrico estático y homogéneo de intensidad α , debe ser *independiente* de la forma particular que se haya elegido para “segmentar” el operador de evolución $\exp[-iH(t-t_0)]$ en (1), así que necesariamente se debe cumplir la condición $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$ para todo orden de integrador simpléctico. Queda pues confirmada la conjetura citada arriba.

3. CONCLUSIONES

Se obtuvo la generalización (22) de la fórmula de evolución iterativa infinitesimal (6). Se mostró que (23) es la solución general (para $t = N\Delta t$) de (22), y corresponde a una “segmentación” arbitraria del operador de evolución según el esquema de integradores simplécticos (2). Esta generalización —que consiste de una aproximación burda de (10)— es muy conveniente, pues así se verifica que (23) es válida tanto para el caso $n = k = 2$, que ya se había tratado en trabajos anteriores, como para cualquier otra “segmentación” mayor, siempre que se verifique la condición $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$. Notemos que, a pesar de la pérdida de precisión de la fórmula aproximada (22) respecto a (10), (22) conserva la información de los coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_i\}$ de tal forma que se cumpla la referida condición. La validez de dicha condición se puede inferir a partir del requerimiento de que el fenómeno físico de la oscilación de Bloch deba permanecer invariante respecto al orden del integrador simpléctico elegido en (2). Una demostración directa (por construcción) de $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$ exigiría desarrollar un algoritmo eficiente para calcular los conjuntos de coeficientes $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ a través de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff, por ejemplo, con la ayuda del paquete computacional de álgebra no-conmutativa “NCAlgebra” [7], pero el esfuerzo computacional se incrementa notablemente a medida que aumenta el orden del integrador. De manera equivalente, aunque no menos complicada, se podría verificar $\mathcal{A}(c_i, d_j) + \mathcal{B}(c_i, d_j) = 1$

por construcción directa, sustituyendo (23) en (10) en lugar de (22), a fin de demostrar (23) por inducción. En el análisis matemático que se presentó en este trabajo, los valores específicos de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ resultan innecesarios, pues se demostró que el periodo de la oscilación de Bloch, como uno de los aspectos relevantes de la dinámica electrónica de enlace fuerte en presencia de un campo eléctrico estático y homogéneo, no depende de dichos coeficientes.

Resulta interesante mencionar que el cálculo específico de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ es un problema actual de relevancia en otras áreas, como por ejemplo en algunos sistemas dinámicos: el péndulo simple y el problema astronómico de tres cuerpos [8]. En estos casos, se muestra que los valores negativos de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$ pueden ocasionar problemas de “estabilidad” en el algoritmo numérico de integración de estos sistemas hamiltonianos. Ciertamente, para un cálculo numérico eficiente, siempre habrá un pequeño error acumulado en las fórmulas (22) y (23) para el integrador simpléctico de orden n en (2); sin embargo, es útil saber que existirán propiedades dinámicas que se mantengan invariantes ante la estructura específica de $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$, pues ello se podría utilizar, además de la condición (3), para encontrar dicha estructura.

Finalmente, mencionemos que para el hamiltoniano dependiente del tiempo $H(t) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}, t)$, la ec. (1) ya no es la solución formal de la ecuación de Schrödinger, por lo que la ec. (6) de evolución infinitesimal debe modificarse para incluir la variación temporal de $V(\mathbf{r}, t)$. En este caso, la extensión del esquema de integradores simplécticos (2) ya no es un asunto trivial, pero se conoce propiedades dinámicas invariantes [1] que servirían para calcular $\{c_i\}$ y $\{d_j\}$. Este asunto permanece como un problema abierto interesante.

El autor expresa su agradecimiento al Prof. Dr. Jean-Pierre Gallinar (Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela), por su valiosa y oportuna colaboración en la revisión de este artículo.

REFERENCIAS

- [1] Sanjinés D., Gallinar J.-P.; *Phys. Rev. B* **64**, 54301 (2001); *Rev. Boliviana de Física* **7**, 16 (2001).
- [2] Liboff R.L.; *Introductory Quantum Mechanics* (Holden-Day, 1980).
- [3] Yoshida H.; *Phys. Lett.* **A150**, 5, 262 (1990).
- [4] *Computer Physics Communications* **63** (1991). Todo este volumen está dedicado a métodos numéricos en dinámica cuántica.
- [5] Swanson M.; *Path Integrals and Quantum Processes* (Academic Press, 1992).
- [6] Abramowitz M., Stegun I.; *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, 1965).
- [7] Helton J.W., Stankus M., Miller R.; *The NCAlgebra SUITE* (<http://math.ucsd.edu/~ncalg>).
- [8] Laskar J., Robutel P.; *High order symplectic integrators for perturbed Hamiltonian systems* (<http://arxiv.org/list/astro-ph/0005074v1>, 4 May 2000).

LA RADIACIÓN ULTRAVIOLETA B DIFUSA MEDICIONES EN COTA COTA, LA PAZ (3420 msnm)

R. Torrez

*Laboratorio de Física de la Atmósfera
Instituto de Investigaciones Físicas—UMSA
La Paz—Bolivia*

RESUMEN

Con el empleo de una banda de sombra seccionada y un sensor de radiación ultravioleta tipo YES, se han realizado una serie de mediciones continuas durante aproximadamente 7 meses a partir de junio del año 2002, en un año con típicas características de efecto niño.

Las series de tiempo por la forma del diseño experimental presentan bandas casi equidistantes de variación continua con regiones de radiación global y regiones de radiación difusa. Estos datos se han procesado de manera de ajustar los máximos de la curva o envolvente superior a una curva polinomio exponencial, y de manera similar para los mínimos de la curva o envolvente inferior.

Con los datos filtrados por este proceso se ha determinado que la radiación ultravioleta B difusa, es en promedio, un tercio de la radiación UVB global, y varía ligeramente alrededor del año. Se ha observado valores máximos en los meses de mayo y agosto, y mínimos en los meses de junio y septiembre. En cuanto a su característica diaria, es máxima alrededor del medio día, y se prolonga ligeramente alrededor de esta hora, disminuyendo su intensidad hacia los extremos del día en la misma proporción a la radiación global.

1. INTRODUCCIÓN

La radiación ultravioleta B que abarca desde 280 hasta 320 nm es monitoreada en el Laboratorio de Física de la Atmósfera, con dos radiómetros UVB del tipo YES. Además de un espectro radiómetro BREWER, para efectos de comparación y monitoreo de la capa de ozono. Con estos instrumentos se ha determinado, entre otros resultados, que la radiación ultravioleta global en el altiplano andino presenta índices mucho mayores a los correspondientes al nivel del mar a la misma latitud. Esto hace suponer también que la radiación ultravioleta B difusa se incrementa, no sabiendo exactamente la forma de esta variación, ni su proporción en la radiación UVB global. Por esta razón se ha diseñado un experimento para determinar estas características.

2. ARREGLO EXPERIMENTAL

Es conocido el uso de la banda de sombra para la medición de la radiación solar difusa (Ref.1). En base a este diseño se ha preparado una banda de sombra seccionada (Fig.1), equidistantemente distribuida, y de igual proyección de área, de manera de tener una distribución de regiones de sombra y no sombra de igual ancho e igualmente espaciada, las figura 2 muestra un día de todos los registros tomados.

Debido a que el arreglo requiere de una corrección casi continua de la posición de la posición de la banda de sombra en el cursor, algunos registros presentan distorsiones por la sombra parcial de la banda, a causa

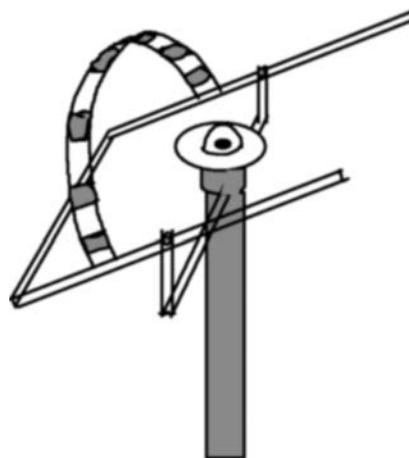


Figura 1. Arreglo experimental de la banda de sombra sobre el detector de UVB.

de correcciones no efectuadas. La banda seccionada de sombra tiene un radio de 19 cm, las placas de sombra tienen un ancho de 3 cm, y largos que varían desde 0.6 hasta 3 cm, y van localizadas cada 20°.

3. REGISTRO Y ANÁLISIS DE DATOS

Los registros obtenidos tienen la forma de la figura 2. Aunque varios de ellos están distorsionados por la presencia de nubes o por falta de corrección a la banda de sombra, en cualquier caso se puede identificar fácilmente

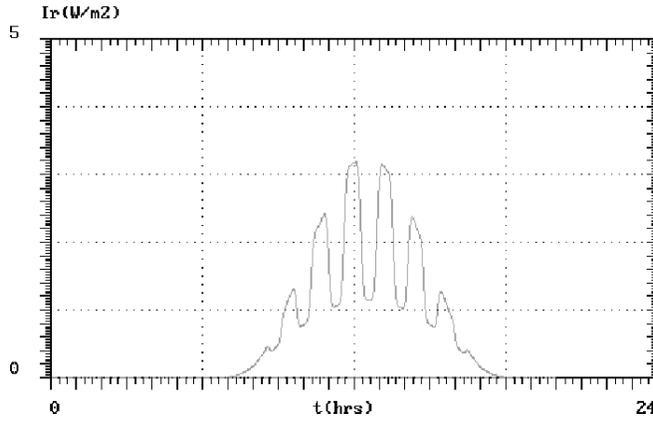


Figura 2. Gráfico de radiación ultravioleta global y difusa obtenida con la banda de sombra seccionada correspondientes al 3 de junio de 2002.

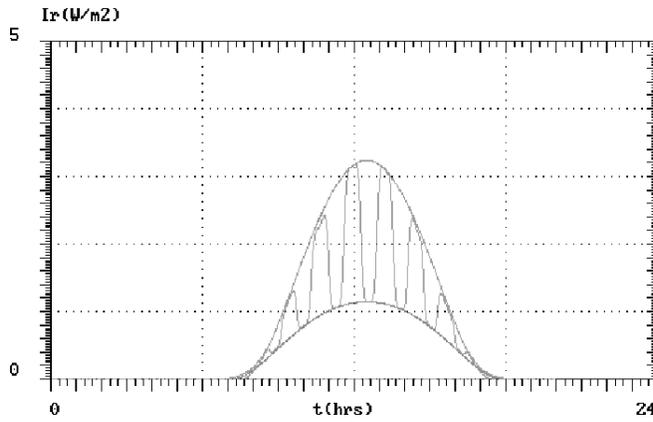


Figura 3. Ajuste de las funciones envolventes a las curvas de radiación global y difusa del gráfico anterior.

el tipo de distorsión del gráfico. Los registros con presencia de nubes no presentan las curvas onduladas de las figura 2, sino algo muy irregular, mientras que los registros con el defecto de falta de corrección de la posición de la banda de sombra, la envolvente inferior no se ajusta a la función polinomio exponencial.

Para seleccionar automáticamente los días claros y buenos, se ha realizado un proceso de comparación automático con los registros del otro sensor de radiación ultravioleta del mismo tipo, y con los registros de un sensor de radiación solar global, de manera que solo se han seleccionado los registros de UVB para los días con una curva solar muy regular, y que presenten una envolvente inferior simétrica. Este proceso ha permitido además validar el equipo con banda de sombra.

Los valores obtenidos según el proceso anterior, han sido sometidos a modelación tanto para la envolvente superior, como para la envolvente inferior de acuerdo a la función (Ref.3):

$$f(x) = a(x - b)^2(c - x)^2 e^{-d(x-e)^2}. \quad (1)$$

Donde los coeficientes a , b , c , d , y e han sido evaluados por mínimos cuadrados, a través de un proceso iterativo. La figura 4 muestra el proceso de ajuste de dos funciones

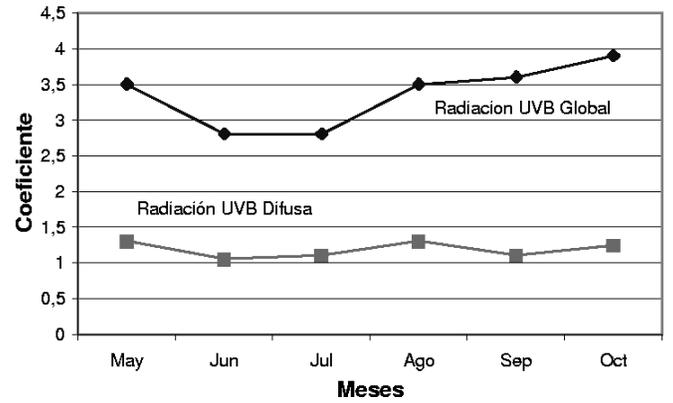


Figura 4. Variación en el periodo de observación de los coeficientes principales de las funciones envolventes. Se puede observar que el coeficiente de la radiación difusa varía ligeramente.

de este tipo a la envolvente superior y a la envolvente inferior.

Llamando $G(x)$ a la envolvente superior, y $D(x)$ a la envolvente inferior. El cociente de la última sobre la anterior; es decir $D(x)/G(x)$ representará la función de proporción de la UVB-difusa sobre la UVB-global, o sea:

$$P(x) = D(x)/G(x), \quad (2)$$

puesto que los coeficientes b , c , y e , son prácticamente similares para las dos envolventes, es decir; la hora de salida y entrada del sol, y la hora del medio día, y puesto que la forma de la curva no afecta esta proporción considerablemente, la relación anterior solo depende de los coeficientes principales a y a' de ambas funciones, es decir:

$$P = a/a'. \quad (3)$$

Donde a es el coeficiente principal de la función ajustada para la radiación difusa, y a' el correspondiente a la radiación global.

Para los registros tomados se han evaluado estos coeficientes en promedio, para los meses desde mayo hasta octubre, la figura 4 muestra la variación de estos coeficientes en el periodo de observación.

El aumento de la radiación UV global en los meses finales, podría atribuirse a los efectos del agujero de ozono antártico, que debido a las corrientes atmosféricas hacia el norte empobrece el ozono troposférico. El incremento de la radiación global significa recíprocamente reducción de la radiación difusa.

4. ANÁLISIS DE ERRORES

De las varias fuentes posibles de error en las mediciones, como el albedo particular de la superficie donde están instalados los equipos de radiación UVB y radiación solar, la presencia muy particular de aerosoles en el lugar (polvo), y la masa del aire, no han sido considerados por la complejidad que significa el análisis de reflexiones múltiples y los demás factores, no obstante,

TABLA 1

Variación de los coeficientes a y a' .

Meses	$a'(W/m^2)$	$a(W/m^2)$	$R(\%)$
Mayo	3,5	1,3	37,14
Junio	2,8	1,05	37,50
Julio	2,8	1,1	39,29
Ago.	3,5	1,3	37,14
Sept.	3,6	1,1	30,56
Oct.	3,9	1,24	31,79
Prom.	3,35	1,18	

se establece que su influencia no es considerable para la longitudes de onda que corresponden a la radiación ultravioleta (Ref.2.p.156).

Otros factores como la presencia de obstáculos en las cercanías, así como del horizonte, permiten establecer que los valores obtenidos son ligeramente inferiores a los reales.

Por su mayor influencia, solo se ha considerado el efecto sombra de las cuadrículas de la banda seccionada en las mediciones tanto de la radiación global, como de la difusa. Esta disminución de la radiación difusa que no llega al sensor en ambos casos es tan solo del orden del 2%, dada la relación de áreas, de la banda, sobre el área de la semiesfera, a la altura del radio donde está ubicada la banda de sombra.

5. CONCLUSIONES

La Tabla 1 permite establecer que: a) La radiación ultravioleta B difusa varía ligeramente alrededor de $1.18W/m^2$, lo que representa aproximadamente un 35% de la radiación UVB global. b) Presenta valores mínimos en los meses de junio y septiembre; de aproximadamente $1.1W/m^2$. c) Presenta valores máximos en los meses de mayo y agosto, donde alcanza $1.3W/m^2$.

Por el gráfico, se observa también que la radiación ultravioleta B difusa varía suavemente comparado con la variación de la radiación ultravioleta global de la que depende. En términos porcentuales la radiación difusa varía entre 30 y 40% de la radiación global, lo que significa por sí mismo, valores altos teniendo en cuenta los elevados índices de radiación ultravioleta que se registran en la ciudad de La Paz.

AGRADECIMIENTOS

El autor expresa su agradecimiento a los investigadores del Laboratorio de Física de la Atmósfera y al personal administrativo del Instituto de Investigaciones Físicas por toda la cooperación brindada en la realización del experimento.

REFERENCIAS

- [1] M. Iqbal. *Introducción a la radiación solar*. 1983. Academic Press.
- [2] M. Peñafiel. *Revista Boliviana de Física* No.7. 2001. Ed. Carrera de Física.
- [3] J. García. *Estudio Comparativo de dos Radiómetros YES*. 2002. LFA.
- [4] *UVB-1 Ultraviolet Pyranometer. Installation and User Guide*. 1997. YES Inc.