

Lista 04 - Introdução à Física Computacional I

Lyliana Myllena Santos de Sousa - 11223740

Lyliana.sousa@usp.br

Ao preparar o Notebook da lista, faça uso abundante de comentários e textos explicativos. Não se esqueça de rotular devidamente os eixos dos gráficos que produzir.

1.

O telescópio espacial James Webb, que deve ser lançado em breve, orbitará o Sol em um dos chamados pontos de Lagrange, em que um objeto permanece em repouso em relação à Terra. Ao longo deste problema, vamos investigar esses pontos em um contexto mais geral, envolvendo dois corpos celestes de massas M_1 e M_2 que descrevem trajetórias circulares em torno de seu centro de massa. Para a descrição do movimento desses corpos e de “corpo de teste”, de massa m desprezível frente a M_1 e M_2 , é conveniente adotar um referencial que gira juntamente com os dois maiores corpos, com a mesma velocidade angular ω destes. Vamos supor que, nesse referencial, o movimento ocorra no plano xy , e vamos adotar o eixo x como aquele em que se situam os centros de M_1 e M_2 . Podemos então escrever os vetores posição dessas massas respectivamente como $\vec{r}_1 = (x_1, y_1)$ e $\vec{r}_2 = (x_2, y_2)$, com $y_1 = y_2 = 0$, $x_1 = -\frac{M_2 R}{M_1 + M_2}$ e $x_2 = \frac{M_1 R}{M_1 + M_2}$, sendo R a distância entre as massas. Como o referencial que adotamos não é inercial, a descrição do movimento requer a introdução de forças fictícias, de modo que a dependência da força resultante efetiva sobre o corpo com sua posição \vec{r} é obtida do potencial efetivo: $V(\vec{r}) = -\frac{GM_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} - \frac{GM_2}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} - \frac{1}{2}\omega^2 |\vec{r}|^2$, sendo $\omega^2 = G(M_1 + M_2)/R^3$.

• Medindo comprimentos em unidades de R , massas em unidades de M_1 e o potencial em unidades de GM_1/R , e supondo $M_2 = M_1/4$, trace um gráfico de curvas de nível de $V(\vec{r})$ que mostre os 5 pontos de Lagrange, três dos quais situam-se no eixo x (dois próximos de M_2 e um do lado oposto em relação a M_1), com os dois outros pontos tendo $y \neq 0$. Procure ajustar os intervalos de x e y , bem como a escala do potencial e o número de curvas de nível, para indicar claramente a existência desses pontos.

(Resposta) Plotarei as curvas de níveis usando a função CountourPlot nos pontos de Lagrange, que consiste nos pontos críticos, ou seja, os pontos onde o gradiente da função é nulo. Utilizando coordenadas cartesianas e as informações do enunciado teremos o nosso potencial efetivo descrito pela seguinte expressão:

$$V(\vec{r}) = V(x, y) = -\frac{1}{\sqrt{\left(x + \frac{M_2 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{1}{4} * \frac{1}{\sqrt{\left(x - \frac{M_1 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{5}{8} * (x^2 + y^2) \quad \left[\frac{GM_1}{R}\right]$$

$$In[] := v[x_, y_] := - \frac{G * M_1}{\sqrt{\left(x + \frac{M_2 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{G * M_2}{\sqrt{\left(x - \frac{M_1 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{1}{2} * \omega^2 * (x^2 + y^2) /.$$

$$\left\{ G \rightarrow 1, R \rightarrow 1, M_1 \rightarrow 1, M_2 \rightarrow \frac{1}{4}, \omega \rightarrow \sqrt{\frac{5}{4}} \right\}$$

optam = {ImageSize → Large, LabelStyle → Large};

[tamanho da imagem] [grande] [estilo de etiqueta] [grande]

ContourPlot[v[x, y], {x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5}, Evaluate[optam],

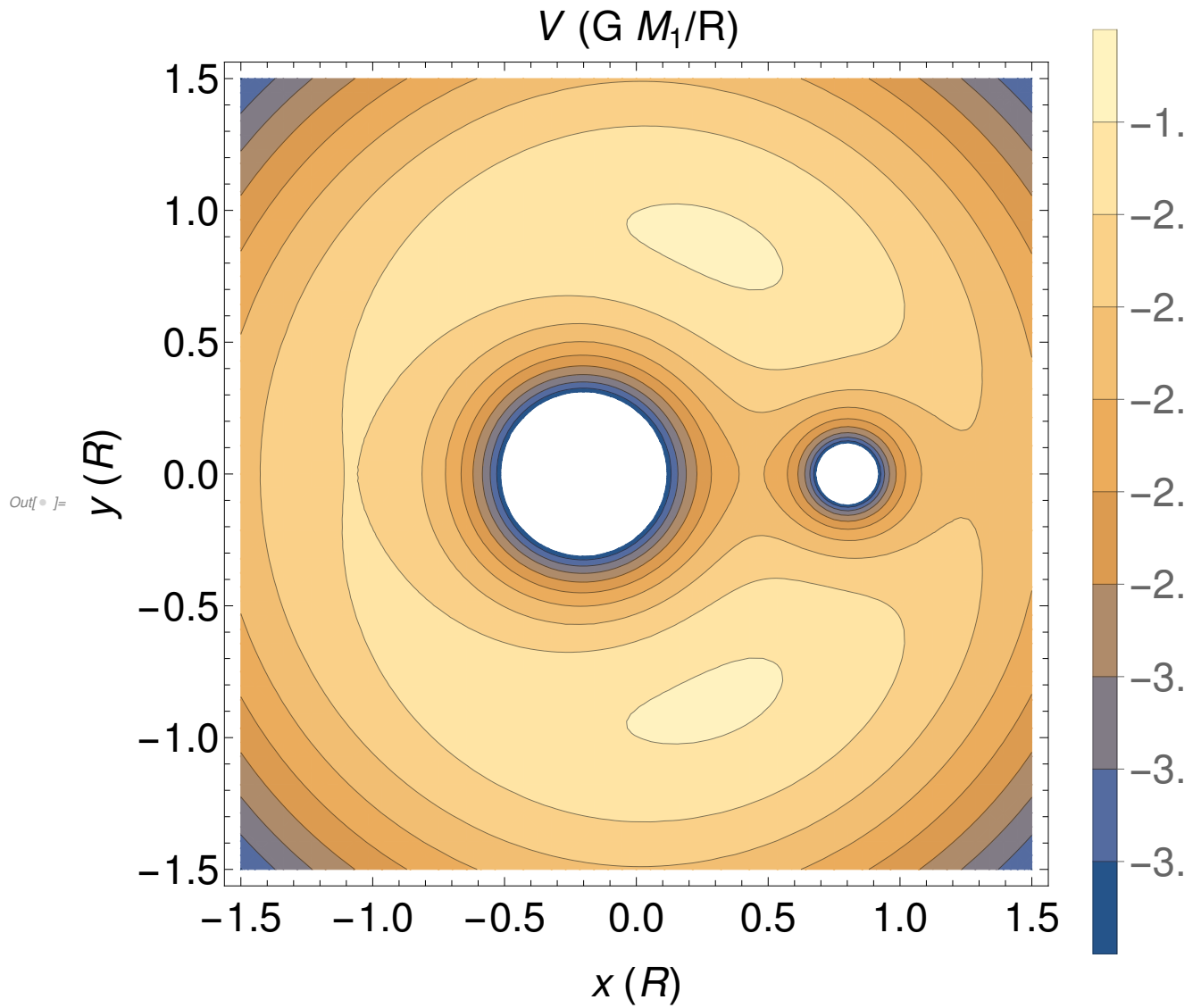
[gráfico de contornos]

[calcula]

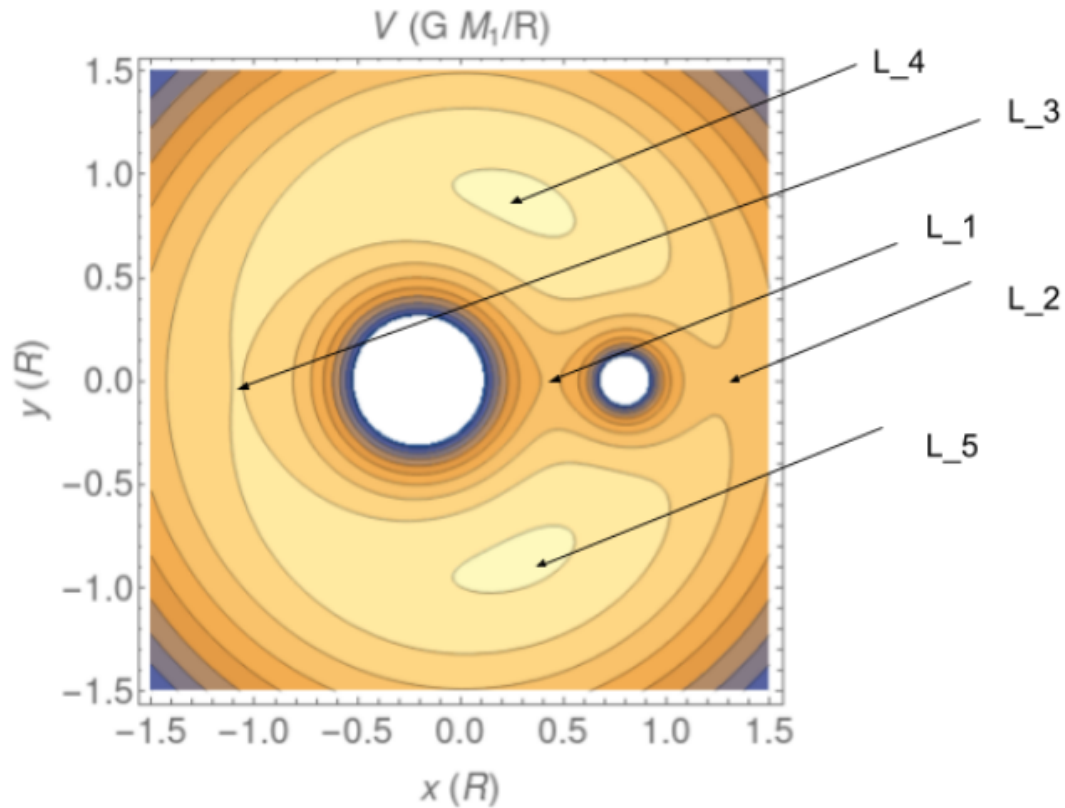
FrameLabel → {"x (R)", "y (R)", "V (G M₁/R)"}, PlotLegends → Automatic]

[legenda do quadro]

[legenda do gráfico] [automático]



Abaixo podemos ver as regiões dos pontos de Lagrange destacadas:



De acordo com a referencia

[http://wray.eas.gatech.edu/physicsplanets2014/LectureNotes/LagrangePointDerivation_MontanaStateU.pdf], as coordenadas dos pontos de Lagrange são dados por:

$$L_1 : \left(R \left[1 - \left(\frac{M_2}{3(M_1 + M_2)} \right)^{1/3} \right], 0 \right)$$

$$L_2 : \left(R \left[1 + \left(\frac{M_2}{3(M_1 + M_2)} \right)^{1/3} \right], 0 \right)$$

$$L_3 : \left(-R \left[1 + \frac{5M_2}{12(M_1 + M_2)} \right], 0 \right)$$

$$L_4 : \left(\frac{R}{2} \left(\frac{M_1 - M_2}{M_1 + M_2} \right), \frac{\sqrt{3}}{2} R \right)$$

$$L_5 : \left(\frac{R}{2} \left(\frac{M_1 - M_2}{M_1 + M_2} \right), -\frac{\sqrt{3}}{2} R \right)$$

$$\text{In}[\circ] := \text{l1} = \text{N}\left[\text{v}\left[\text{R}\left(1 - \left(\frac{\text{M}_2}{3 * (\text{M}_1 + \text{M}_2)}\right)^{1/3}\right), 0\right]\right];$$

[valor numérico]

$$\text{l2} = \text{N}\left[\text{v}\left[\text{R}\left(1 + \left(\frac{\text{M}_2}{3 * (\text{M}_1 + \text{M}_2)}\right)^{1/3}\right), 0\right]\right];$$

[valor numérico]

$$\text{l3} = \text{N}\left[\text{v}\left[-\text{R}\left(1 + \frac{5 \text{M}_2}{12 * (\text{M}_1 + \text{M}_2)}\right), 0\right]\right];$$

[valor numérico]

$$\text{l4} = \text{N}\left[\text{v}\left[-\left(\frac{\text{R} (\text{M}_1 - \text{M}_2)}{2 (\text{M}_1 + \text{M}_2)}\right), \frac{\sqrt{3}}{2} \text{R}\right]\right];$$

[valor numérico]

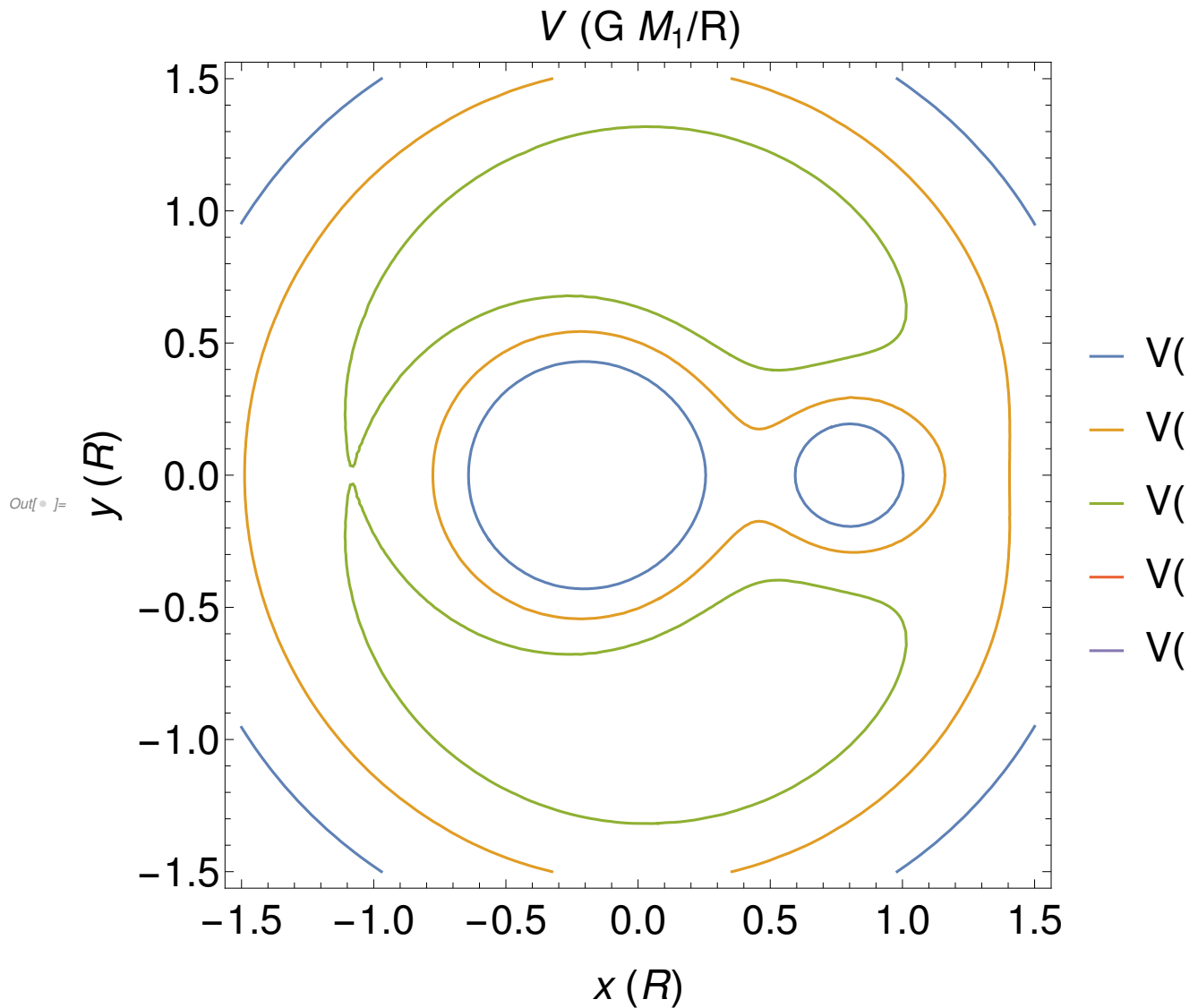
$$\text{l5} = \text{N}\left[\text{v}\left[-\left(\frac{\text{R} (\text{M}_1 - \text{M}_2)}{2 (\text{M}_1 + \text{M}_2)}\right), -\frac{\sqrt{3}}{2} \text{R}\right]\right];$$

[valor numérico]

```

In[ ]:= ContourPlot[{v[x, y] == l1, v[x, y] == l2, v[x, y] == l3, v[x, y] == l4, v[x, y] == l5},
  gráfico de contornos
  {x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5}, Evaluate[optam],
  calcula
  FrameLabel -> {"x (R)", "y (R)", "V (G M1/R)"},
  legenda do quadro
  PlotLegends -> {"V(L1)", "V(L2)", "V(L3)", "V(L4)", "V(L5)"}
  legenda do gráfico

```



- Esses pontos caracterizam-se pelo fato de que neles a força efetiva, proporcional ao gradiente de $V(\vec{r})$, é nula. Determine numericamente as posições dos 5 pontos, ainda para o caso $M_2 = M_1/4$.

(Resposta) Dizer que nos pontos de lagrange o gradiente do potencial efetivo é nulo, equivale à:

$$\nabla \vec{V}(\vec{r}) = \vec{0} \rightarrow |\nabla \vec{V}(\vec{r})|^2 = 0$$

```
In[ ]:= mv = Grad[v[x, y], {x, y}].Grad[v[x, y], {x, y}];
```

|gradiente |gradiente

```
pontoslagrange = NSolve[mv == 0, {x, y}]
```

|solução numérica

*** **NSolve:** Infinite solution set has dimension at least 1. Returning intersection of solutions with

$$-\frac{121001x}{175984} - \frac{92291y}{87992} == 1.$$

```
Out[ ]:= {{x -> 0.137607 - 0.918329 i, y -> -1.04363 + 0.602002 i},
{x -> 0.137607 + 0.918329 i, y -> -1.04363 - 0.602002 i},
{x -> -1.04502 - 0.0196832 i, y -> -0.268365 + 0.0129032 i},
{x -> -1.04502 + 0.0196832 i, y -> -0.268365 - 0.0129032 i},
{x -> -0.00449768 - 0.0443663 i, y -> -0.950471 + 0.0290839 i},
{x -> -0.00449768 + 0.0443663 i, y -> -0.950471 - 0.0290839 i}}
```

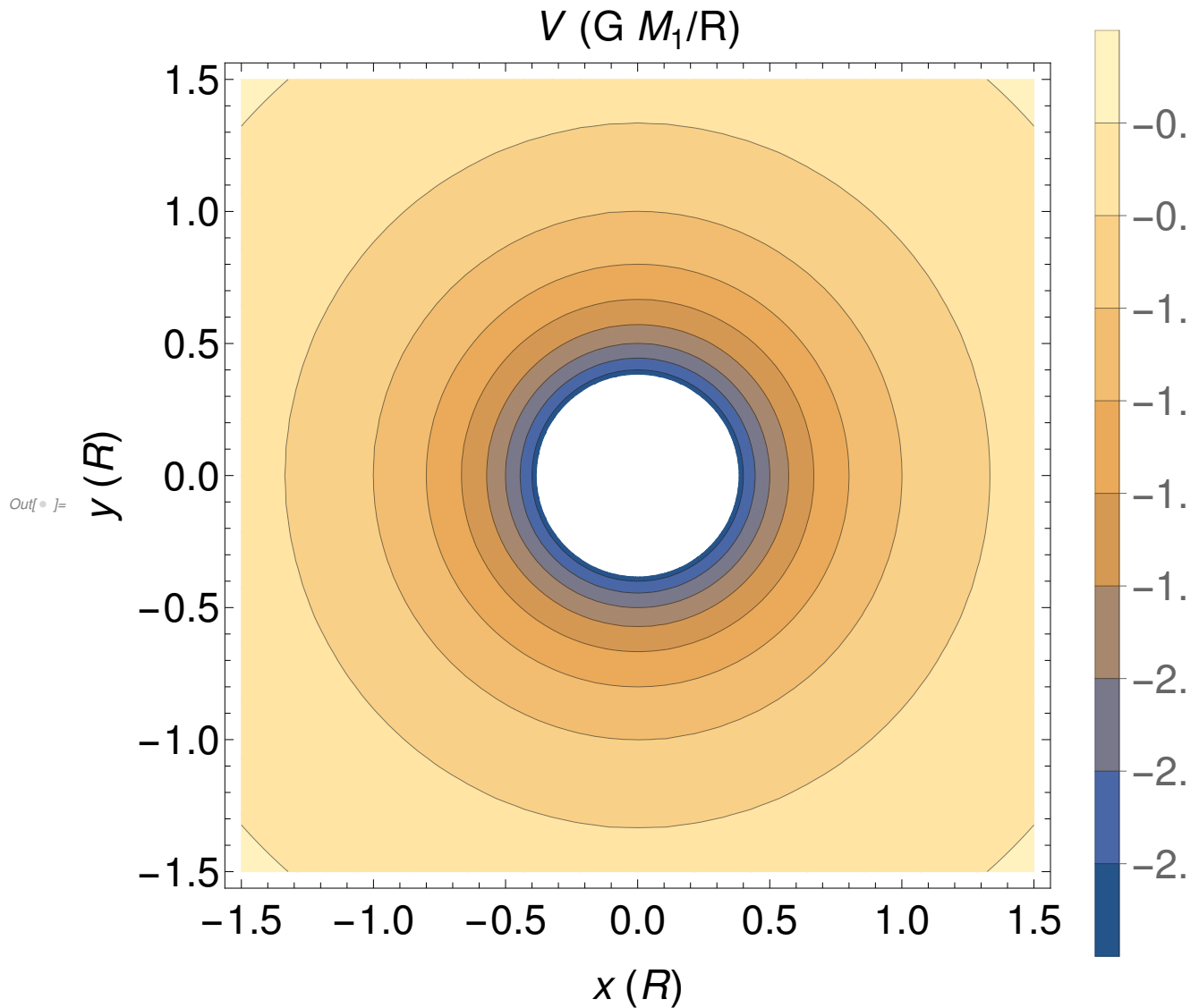
• Escolha agora $M_2 = 3 \cdot 10^{-6} M_1$, correspondente à situação da Terra em relação ao Sol, e procure encontrar as posições dos dois pontos de Lagrange próximos à Terra. Com base nessa solução e no valor da distância entre a Terra e o Sol, determine a distância a que o James Webb estará da Terra quando estiver funcionando. (O equilíbrio nesses pontos de Lagrange próximos à Terra é instável, de modo que o telescópio precisará ser reposicionado periodicamente.)

$$\text{In}[\text{ }] := \text{vsol}[x_ , y_] := - \frac{G * M_1}{\sqrt{\left(x + \frac{M_2 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{G * M_2}{\sqrt{\left(x - \frac{M_1 R}{M_1 + M_2}\right)^2 + y^2}} - \frac{1}{2} * \omega^2 * (x^2 + y^2) /.$$

$$\left\{ G \rightarrow 1, R \rightarrow 1, M_1 \rightarrow 1, M_2 \rightarrow 3 * 10^{-6}, \omega \rightarrow \sqrt{3 * 10^{-6}} \right\}$$

ContourPlot[vsol[x, y], {x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5}, Evaluate[optam],
[gráfico de contornos](#) [calcula](#)

FrameLabel → {"x (R)", "y (R)", "V (G M₁/R)"}, PlotLegends → Automatic]
[legenda do gráfico](#) [automático](#)



In[]:= **Clear**[l1, l2]

[apaga](#)

$$l1 = N\left[\text{vsol}\left[R \left(1 - \left(\frac{M_2}{3 * (M_1 + M_2)} \right)^{1/3} \right), 0 \right] \right];$$

[valor numérico](#)

$$l2 = N\left[\text{vsol}\left[R \left(1 + \left(\frac{M_2}{3 * (M_1 + M_2)} \right)^{1/3} \right), 0 \right] \right];$$

[valor numérico](#)

ContourPlot[{vsol[x, y] == l1, vsol[x, y] == l2},

[gráfico de contornos](#)

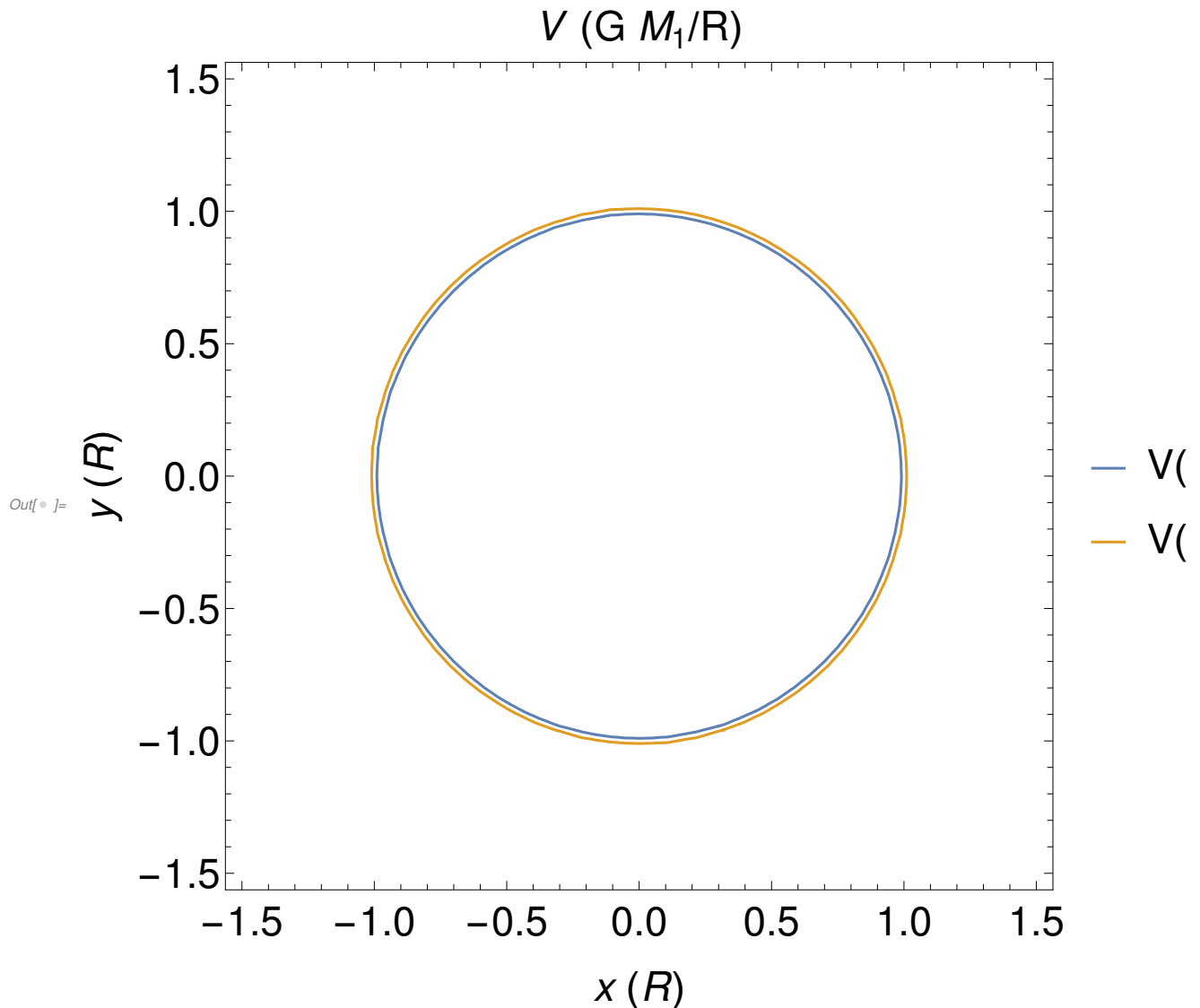
{x, -1.5, 1.5}, {y, -1.5, 1.5}, Evaluate[**optam**],

[calcula](#)

FrameLabel → {"x (R)", "y (R)", "V (G M₁/R)"}, **PlotLegends** → {"V(L₁) ", "V(L₂) "}

[legenda do quadro](#)

[legenda do gráfico](#)

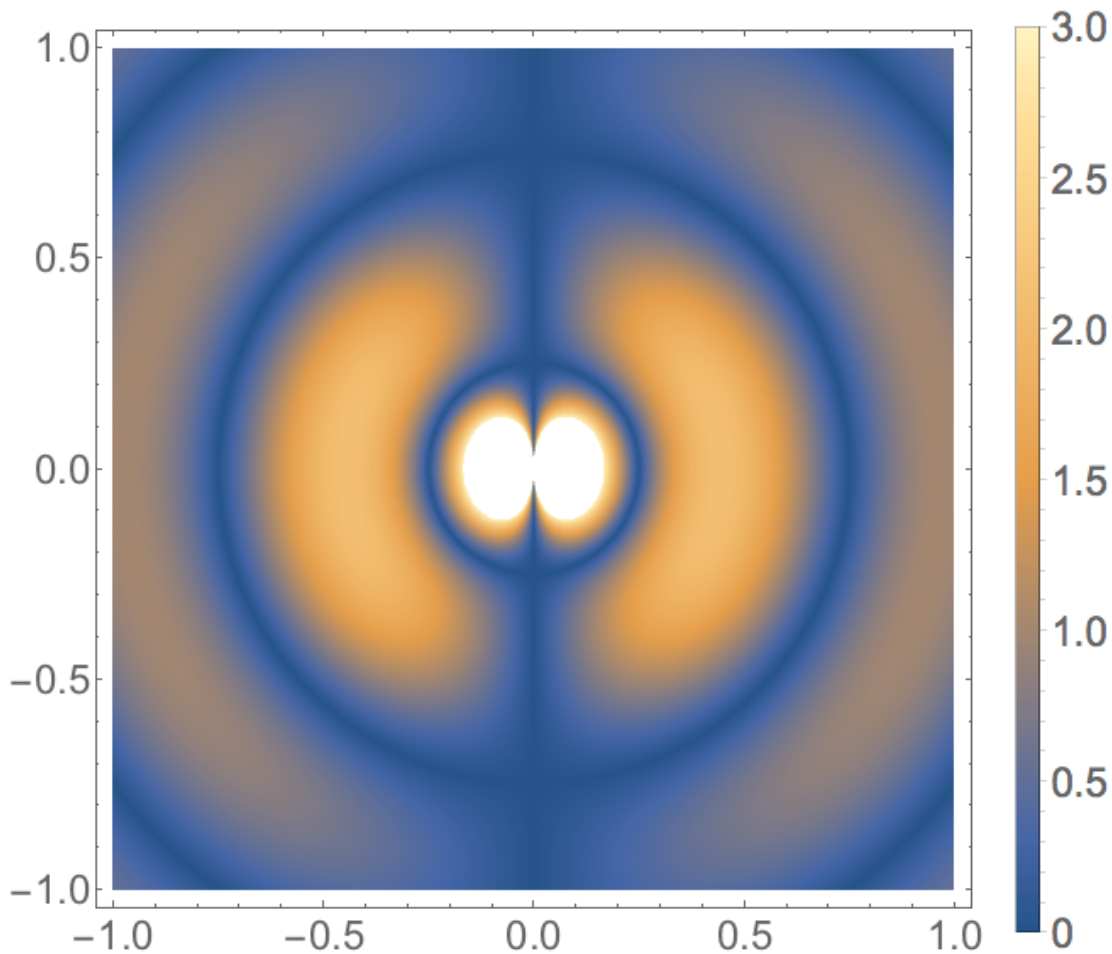


2.

Um dipolo elétrico posicionado na origem e oscilando na direção z produz radiação eletromagnética (veja Griffiths, Introduction to Electrodynamics). O campo elétrico correspondente na posição \vec{r} e no instante t é dado por: $\vec{E} = -\frac{A}{r} \sin[\theta] \cos[\omega(t - r/c)] \hat{\theta}$, sendo $r = |\vec{r}|$, A uma constante, ω a frequência angular de oscilação do dipolo, c a velocidade da luz, θ o ângulo com o eixo $+z$, $\hat{\theta}$ o vetor unitário: $\hat{\theta} = \cos[\theta] \cos[\phi] \hat{x} + \cos[\theta] \sin[\phi] \hat{y} - \sin[\theta] \hat{z}$ e ϕ o ângulo azimutal das coordenadas esféricas.

- Crie uma animação do padrão do módulo do campo elétrico no plano yz , correspondente a $x = 0$, ou seja, $\phi = \pi/2$. Você pode escolher unidades em que $A = c = \omega = 1$. A animação deve conter 24 quadros por período do movimento, com cada quadro correspondendo a uma gráfico de densidade produzido a partir do módulo do campo elétrico. Utilize um intervalo fixo de valores do módulo do

campo elétrico para todos os quadros, e escolha uma número de pontos em cada quadro que produza padrões suaves. Para servir de guia, eis o quadro correspondente a $t = 0$:



(Resposta) Para criar a animação, primeiro vou definir a função módulo do campo elétrico, convertendo coordenadas polares para as coordenadas cartesianas do plano yz, onde

$r = |\vec{r}| = \sqrt{y^2 + z^2}$ e $\theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{\sqrt{y^2 + z^2}}\right)$. Assim, o módulo do campo elétrico será dado por:

$$|\vec{E}(r, \theta, t)| = \left| \frac{A}{r} \sin[\theta] \cos[\omega(t - r/c)] \right| \rightarrow |\vec{E}(y, z, t)| = \left| \frac{A}{\sqrt{y^2 + z^2}} \sin\left[\cos^{-1}\left(\frac{z}{\sqrt{y^2 + z^2}}\right)\right] \cos\left[\omega\left(t - \sqrt{y^2 + z^2} / c\right)\right] \right|$$

Utilizando $A = c = 1$ e com uma pequena alteração do que foi dito no enunciado e considerando $\omega = 2\pi$. Temos:

$$|\vec{E}(y, z, t)| = \left| \frac{1}{\sqrt{y^2 + z^2}} \sin\left[\cos^{-1}\left(\frac{z}{\sqrt{y^2 + z^2}}\right)\right] \cos\left[\omega\left(t - \sqrt{y^2 + z^2}\right)\right] \right|. \text{ Com isso, utilizarei a}$$

função DensityPlot para observar o comportamento do campo elétrico. Abaixo, temos um teste, mostrando que chegamos em um resultado parecido com o do professor.

In[]:= CE[y_, z_, t_] := Abs[
[valor absoluto] $\frac{1}{\sqrt{y^2 + z^2}}$ * Sin[
[s...] $\text{ArcCos}\left[\frac{z}{\sqrt{y^2 + z^2}}\right]$ * Cos[
[cosseno] $2 \pi * \left(t - \sqrt{y^2 + z^2}\right)$]]

optam = {ImageSize → Large, LabelStyle → Large};

[tamanho da i...] [grande] [estilo de etiqueta] [grande]

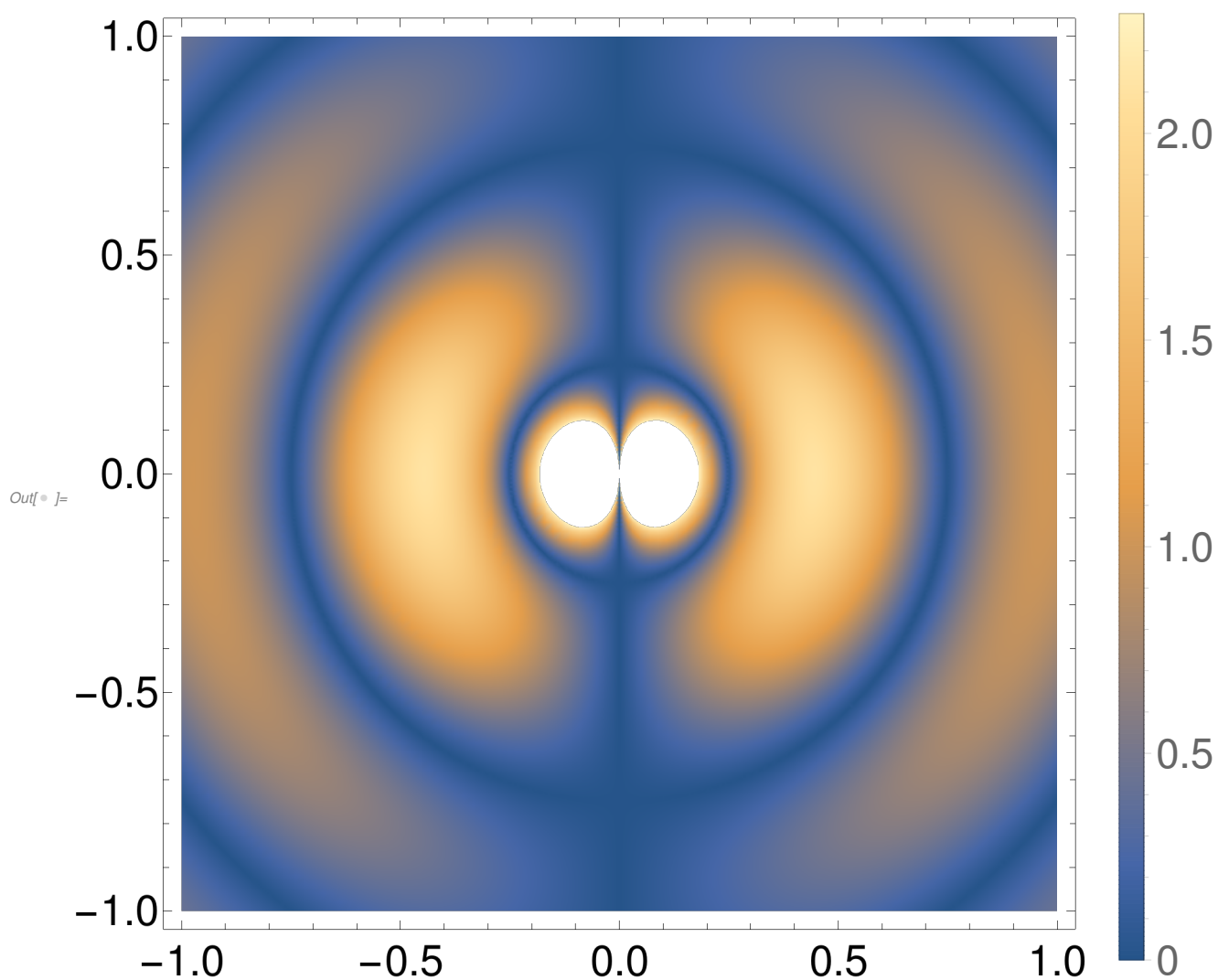
DensityPlot[CE[y, z, 0], {y, -1, 1}, {z, -1, 1},

[gráfico de densidade]

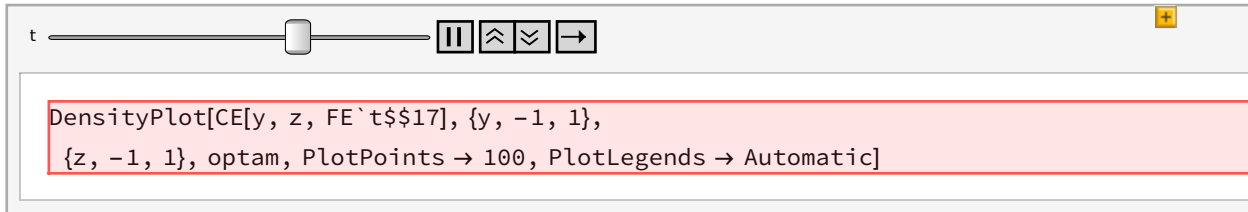
Evaluate[optam], PlotPoints → 100, PlotLegends → Automatic]

[calcula]

[número de pontos no ...] [legenda do gráfico] [automático]



```
In[ ]:= Animate[DensityPlot[CE[y, z, t], {y, -1, 1}, {z, -1, 1}, Evaluate[optam],
  |anima |gráfico de densidade |calcula
  PlotPoints → 100, PlotLegends → Automatic], {t, 0, 2 π, 1 / 24}]
  |número de pontos no ... |legenda do gráfico |automático
```



• A partir de uma tabela de imagens, o Mathematica é capaz de produzir arquivos ‘gif’ animados. Se sua tabela tem o nome de ‘tabela’, para produzir um arquivo ‘animado.gif’ que se repita infinitamente utilize a sintaxe **Export[“animado.gif”,tabela,”AnimationRepetitions” → ∞]**. Implemente isso em seu notebook e envie pelos campos mais abaixo o ‘gif’ animado que produzir, juntamente com o próprio notebook.

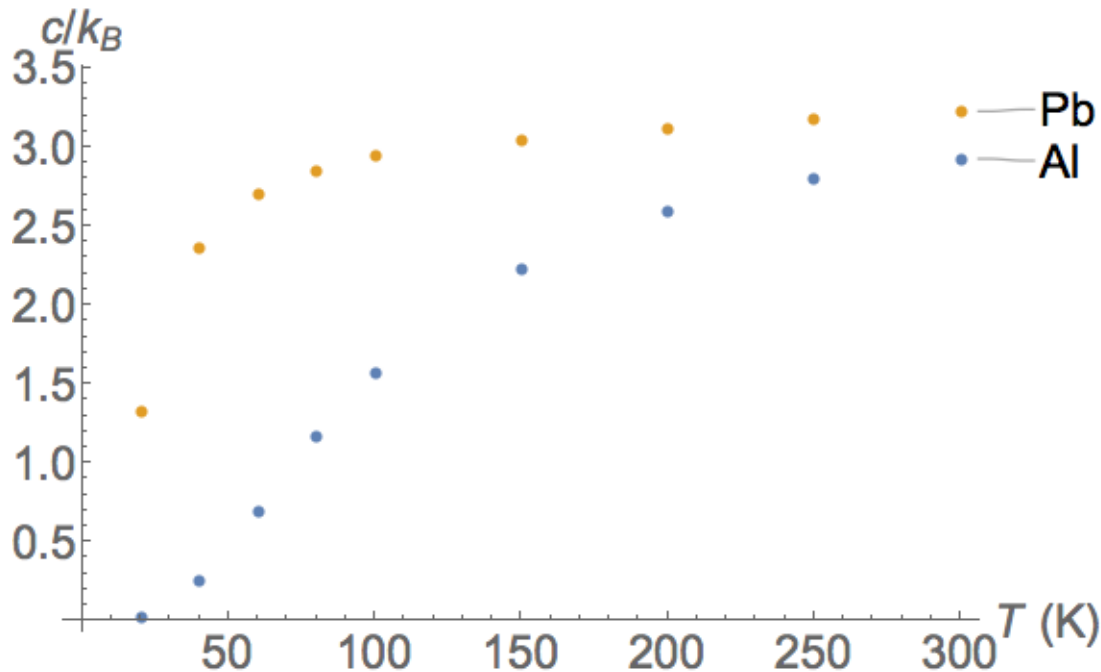
```
In[ ]:= Export["animado.gif", %, "AnimationRepetitions" → ∞]
  |exporta |repetições de animação
```

```
Out[ ]:= animado.gif
```

3.

O calor específico de sólidos cristalinos, na temperatura ambiente, é em geral próximo de $3 k_B$, sendo k_B a constante de Boltzmann. (O calor específico a que nos referimos aqui é a capacidade térmica por átomo, e a capacidade térmica, por sua vez, é a razão entre a energia térmica transferida para um corpo e a variação de temperatura associada a essa transferência.) Esse comportamento é bem descrito por um modelo clássico de um sólido como uma coleção de átomos ligados por molas microscópicas. No entanto, efeitos quânticos fazem com que, em baixas temperaturas, o calor específico diminua muito. Dois modelos simples foram propostos nas primeiras décadas do século XX, por Einstein e por Debye, respectivamente, para dar conta dessa diminuição. Os dois modelos são discutidos na disciplina de Mecânica Estatística. Neste problema, você deve buscar ajustar dados experimentais do calor específico do alumínio e do chumbo, utilizando ambos os modelos.

• Utilizando o botão direito do mouse e a opção “Salvar link como” (ou similar), baixe os dados experimentais para o alumínio e o chumbo em função da temperatura (em kelvin). Esses dados correspondem ao calor específico por mol. Após importá-los, para convertê-los para calor específico por átomo, você deve dividir cada medida de calor específico pela “constante universal dos gases”, $R = k_B N_A = 8.31 \text{ J / K} \cdot \text{mol}$, sendo N_A o número de Avogadro. Assegure-se de dividir por R apenas a segunda coluna de cada tabela de dados. Produza um gráfico mostrando o comportamento do calor específico para ambos os sólidos, que deve se assemelhar ao mostrado na figura abaixo.



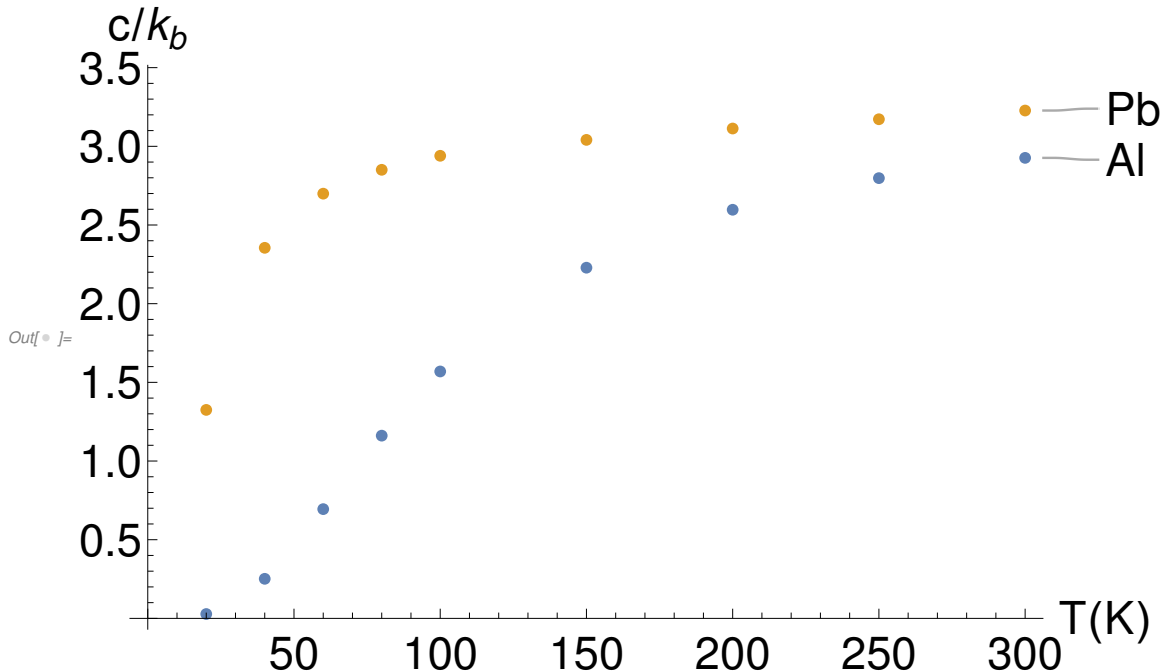
(Resposta) Começarei chamando os dados e convertendo a segunda coluna para calor específico por átomo. Após isso, realizarei o plot.

```
In[ ]:= SetDirectory[NotebookDirectory[]];
         |define diretório |diretório do notebook
Pb = Import["dados_Pb.dat"];
      |importa
dPb = Transpose[Pb];
      |transposição
TPb = dPb[[1]];
CalorPb =  $\frac{dPb[[2]]}{8.31}$ ;
dadoPb = Transpose[{TPb, CalorPb}];
          |transposição
Al = Import["dados_Al.dat"];
      |importa
dAl = Transpose[Al];
      |transposição
TAl = dAl[[1]];
CalorAl =  $\frac{dAl[[2]]}{8.31}$ ;
dadoAl = Transpose[{TAl, CalorAl}];
          |transposição
```

```

In[ ]:= grafico = ListPlot[{dadoAl, dadoPb}, PlotLabels -> {"Al", "Pb"},
    |gráfico de uma lista de valores |etiquetas de representação
    AxesLabel -> {"T(K)", "c/kb"}, ImageSize -> Large, LabelStyle -> Large]
    |legenda dos eixos |tamanho da i... |grande |estilo de etiqueta |grande

```



• Primeiro faça o ajuste dos dados utilizando o modelo de Einstein. Segundo esse modelo, a energia interna por átomo, dividida por k_B , é dada por: $\frac{u}{k_B} = \frac{3}{2} \frac{\hbar \omega}{k_B} \frac{\text{Exp}[\hbar \omega / k_B T] + 1}{\text{Exp}[\hbar \omega / k_B T] - 1}$, em que \hbar é a constante de Planck reduzida e ω é a frequência dos osciladores de Einstein em um dado material. Utilizando a relação termodinâmica $\hbar = k_B = 1$ (o que equivale nesse caso a medir frequências em kelvin!), determine o valor de ω que melhor ajusta (por mínimos quadrados) os dados experimentais para cada sólido, usando como palpite inicial para a frequência o valor T^* da temperatura em que o calor específico atinge (aproximadamente) a metade do seu valor de altas temperaturas. (Grosseiramente, podemos dizer que essa temperatura separa os regimes “quântico” e “clássico”).

(Resposta) Observando no gráfico percebemos que a T^* para cada sólido será calculado medindo com o cursor o valor do calor específico em 300 K e procurando, no caminho que os dados parecem percorrer, o valor da temperatura para metade desse calor:

```

In[ ]:= estrelaTPb = 20.5;
    estrelaTAl = 93.8;

```

O calor específico é dado pela derivada da energia interna pela temperatura, com isso temos a seguinte expressão:

```
In[ ]:= ceinstein[T_] := D[
$$\frac{3}{2} * \omega * \frac{\text{Exp}[\omega / T] + 1}{\text{Exp}[\omega / T] - 1}, T]$$

```

```
ajusteeinsteinPb = FindFit[dadoPb, ceinstein[T], {{\omega, estrelaTPb}}, T]
encontra parâmetros de ajuste
```

```
ajusteeinsteinAl = FindFit[dadoAl, ceinstein[T], {{\omega, estrelaTAl}}, T]
encontra parâmetros de ajuste
```

```
Out[ ]:= {\omega \to 65.5686}
```

```
Out[ ]:= {\omega \to 276.714}
```

• Agora faça o ajuste dos dados utilizando o modelo de Debye. Nesse caso, o calor específico é dado por: $c = 9k_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{\frac{T_D}{T}} d\eta \frac{\eta^4 e^\eta}{(e^\eta - 1)^2}$, em que T_D é a temperatura de Debye, uma propriedade de cada material. Determine o valor de T_D que melhor ajusta (por mínimos quadrados) os dados experimentais para cada sólido, usando como palpite inicial para T_D o valor correspondente de T^* do item anterior.

```
In[ ]:=
```

```
cdebye[T_] := 9 * 
$$\left(\frac{T}{td}\right)^3 * \text{NIntegrate}\left[\frac{x^4 * \text{Exp}[x]}{(\text{Exp}[x] - 1)^2}, \{x, 0, \frac{td}{T}\}\right]$$

```

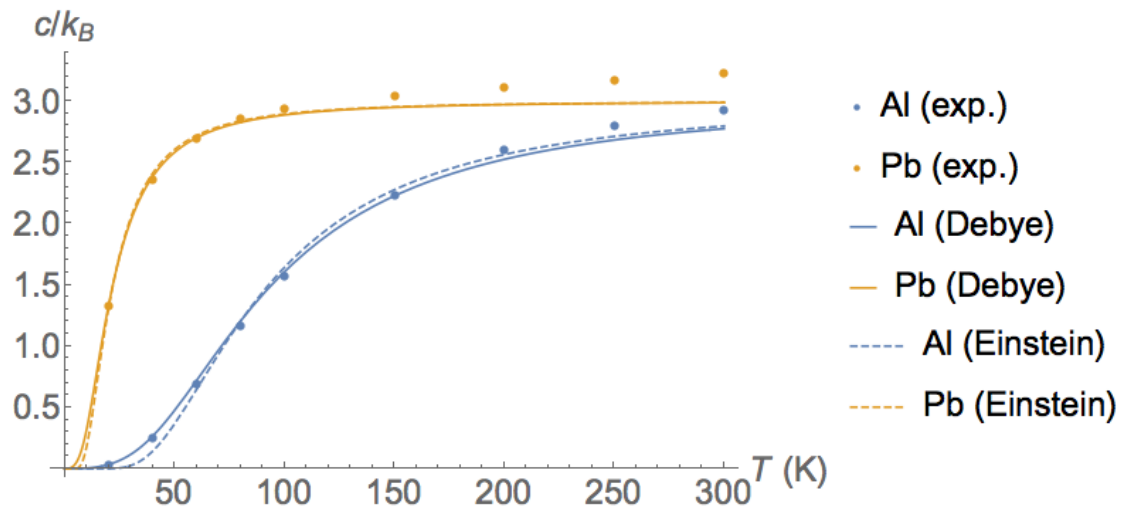
```
ajustedebyePb = FindFit[dadoPb, cdebye[T], {{td, estrelaTPb}}, T]
encontra parâmetros de ajuste
```

```
ajustedebyeAl = FindFit[dadoAl, cdebye[T], {{td, estrelaTAl}}, T]
encontra parâmetros de ajuste
```

```
Out[ ]:= {td \to 88.0244}
```

```
Out[ ]:= {td \to 378.439}
```

• Por fim, faça um gráfico mostrando os dados experimentais e os ajustes por ambos os modelos. Você deve obter algo semelhante ao mostrado na figura abaixo, de onde se pode notar, observando o caso do alumínio, que ambos os modelos fornecem uma descrição teórica comparável em temperaturas acima de T^* , mas que o modelo de Debye é muito mais preciso em temperaturas mais baixas.



```

In[ ]:= graficoexp = ListPlot[{dadoAl, dadoPb}, PlotLegends → {"Al(exp.)", "Pb(exp.)"},
    gráfico de uma lista de valores      legenda do gráfico

    AxesLabel → {"T(K)", "c/kb"}, ImageSize → Large, LabelStyle → Large];
    legenda dos eixos      tamanho da i... grande      estilo de etiqueta grande

graficoEinstein = Plot[{Evaluate[ceinstein[T] /. ajusteeinsteinAl],
    gráfico calcula

    Evaluate[ceinstein[T] /. ajusteeinsteinPb]}, {T, 1, 300}, PlotStyle → {Dashed},
    calcula      estilo do gráfico tracejado

    PlotLegends → {"Al(Einstein)", "Pb(Einstein)"}, AxesLabel → {"T(K)", "c/kb"},
    legenda do gráfico      legenda dos eixos

    ImageSize → Large, LabelStyle → Large, PlotPoints → 200];
    tamanho da i... grande      estilo de etiqueta grande      número de pontos no gráfico

graficoDebye = Plot[{Evaluate[cdebye[T] /. ajustedebyeAl],
    gráfico calcula

    Evaluate[cdebye[T] /. ajustedebyePb]}, {T, 1, 300}, PlotStyle → {Thick},
    calcula      estilo do gráfico espesso

    PlotLegends → {"Al(Debye)", "Pb(Debye)"}, AxesLabel → {"T(K)", "c/kb"},
    legenda do gráfico      legenda dos eixos

    ImageSize → Large, LabelStyle → Large, PlotPoints → 200];
    tamanho da i... grande      estilo de etiqueta grande      número de pontos no gráfico

Show[{graficoexp, graficoDebye, graficoEinstein}]
mostra

```

