

Cadeias FPU e a Equação de KdV

Nota Histórica

O problema de Fermi-Pasta-Ulam possui o nome de 3 cientistas que se propuseram a estudar como uma rede cristalina evoluía para o equilíbrio térmico ao longo do tempo. A ideia base era simular uma longa cadeia de partículas ligadas entre si por uma interação linear (Potencial de Hooke) mas com uma pequena perturbação não linear. O modelo físico intuitivo corresponde ao apresentado na figura 1. O seu trabalho foi inicialmente apresentado no relatório [1]

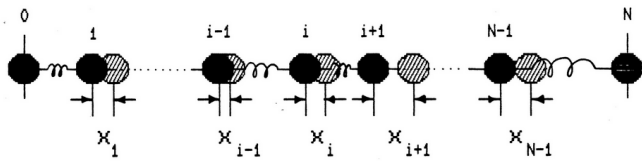


Figura 1: Modelo Físico do problema em questão

Intuitivamente somos levados a pensar que, devido a esta contribuição não linear, a energia num dos modos normais de oscilação seria lentamente distribuída por todos até que a equipartição da energia prevista pela física estatística fosse alcançada. Como veremos abaixo, e como foi constatado inicialmente, nos primeiros ciclos de oscilação, a energia parece de facto ser redistribuída pelo outros modos normais de oscilação, no entanto, após um longo período de tempo, a energia volta quase na sua totalidade ao modo de frequência mais baixa e a redistribuição termodinâmica não é observada na maioria dos casos. Este resultado surpreendente é conhecido como o paradoxo de Fermi-Pasta-Ulam e demonstra que a não linearidade do potencial associado não garante a equipartição da energia.

Procurando uma solução para o paradoxo, Zabusky e Kruskal mostraram a ligação entre este problema no limite contínuo e a equação de Korteweg-de-Vries pela primeira vez em [4].

Propomo-nos então neste trabalho a: estudar o oscilador harmónico e não harmónico como introdução ao modelo físico; reproduzir os resultados originais de Fermi, Pasta e Ulam e por fim comparar o comportamento de uma onda gaussiana em movimento numa cadeia linear e numa outra não linear.

Mecânica de N osciladores

Como já referido, o problema a modelar é o apresentado na figura 1. Começamos por analisar o caso em que todas as interações são lineares. Neste caso o Hamiltoniano do sistema é dado por:

$$H \equiv H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}k(q_{i+1} - q_i)^2 \quad (1)$$

É idêntico à energia do sistema. As coordenadas generalizadas q_i são consideradas como a distância de cada uma das massas à sua posição de equilíbrio.

Modelos físicos com este Hamiltoniano pertencem a uma classe de problemas já intensivamente estudados e conhecidos. Para casos simples, a solução é facilmente obtida e é-nos assim possível comparar o método numérico utilizado com uma solução exata.

Passemos agora a incluir as perturbações referidas. Existem três modelos para o sistema físico a representar. O Hamiltoniano destes pode ser escrito como:

$$H = H_0 + \sum_i \frac{\alpha}{3}(q_{i+1} - q_i)^3 + \frac{\beta}{4}(q_{i+1} - q_i)^4 \quad (2)$$

Os três modelos correspondem respetivamente ao modelo FPU- α onde só é acrescentado o potencial cúbico; O modelo FPU- β onde só é acrescentado o potencial quártico e um terceiro onde se incluem os dois potenciais referidos.

Das equações canónicas de Hamilton obtemos então a equação que temos de resolver numericamente para o nosso sistema:

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= m\ddot{q}_i = (q_{i+q} + q_{n-q} - 2q_i) \\ &\quad - \alpha[(q_{i+1} - q_i)^2 - (q_i - q_{i-1})^2] \\ &\quad - \beta[(q_{i+1} - q_i)^3 - (q_i - q_{i-1})^3] \end{aligned} \quad (3)$$

Este sistema de equações acopladas permite-nos obter a evolução das posições do sistema de molas. No entanto, visando reproduzir os resultados da experiência original [1], torna-se útil estudar o problema em termos dos modos normais de oscilação associado ao oscilador harmónico simples. Como a nossa cadeia de osciladores se encontra com os extremos fixos, torna-se útil recorrer seguinte transformada discreta de Fourier das coordenadas generalizadas:

$$a_k = \sum_i q_i \sin\left(\frac{\pi k i}{N}\right) \quad (4)$$

Como o nosso problema é uni-dimensional e as coordenadas associadas são cartesianas, podemos identificar \dot{q}_i com p_i/m , e assim obter a expressão para \dot{a}_k por simples substituição na expressão (4).

Desprezando as contribuições dos termos associados às pequenas oscilações, Conseguimos obter a energia no modo normal k sendo esta dada por:

$$E_k = \frac{1}{2}\dot{a}_k^2 + 2a_k^2 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right) \quad (5)$$

Comentário Prévio ao Código

O código utilizado para as simulações subsequentes foi escrito em C++ com recurso tanto às funcionalidades tradicionais de classes como a bibliotecas open-source.

Em particular foi utilizada a biblioteca Odeint que fornece uma grande variedade de métodos numéricos para sistemas de equações ordinárias diferenciais. Com base no código fornecido na documentação desta mesma biblioteca, foi escrito o código com o acréscimo dos métodos da transformada

discreta de Fourier e de algumas funções de inicialização. Para um melhor entendimento, aconselha-se a leitura do ficheiro `'readme.txt'` que acompanha o projeto.

O oscilador harmónico simples

Após implementado o código, procurou-se verificar se a solução encontrada se encontrava de acordo com os resultados analíticos. Procurou-se então testar o código para uma única partícula com um potencial harmónico. Para tal, definiram-se as quantidades α e β como nulas e, devido à natureza do sistema ser conservativo, procuraram-se soluções em função da energia do sistema. Sendo o Hamiltoniano igual à energia total, temos a implicação de que:

$$H = E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 \quad (6)$$

Que no caso em que $m = k = 1$ simplifica para $2E = p^2 + q^2$. Vemos então que a trajetória do sistema no espaço de fases é uma circunferência centrada na origem e de raio $\sqrt{2E}$. Na figura 3 encontra-se o espaço de fase obtido para o oscilador harmónico simples. Constatamos de facto que as trajetórias fechadas correspondentes a linhas de energia constante, são de facto circunferências centradas na origem e que a nossa simulação se encontra a correr correctamente.

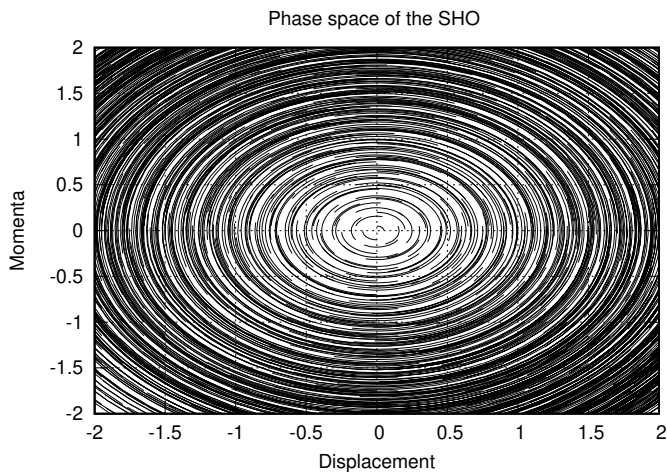


Figura 3: Espaço de Fase associado ao oscilador harmónico simples

Introduzimos agora a perturbação do tipo α . Consta-

tamos de imediato que, devido à natureza ímpar do potencial associado, existiram órbitas abertas no espaço de fases. Caso este fosse o único potencial associado, todas as partículas seriam repelidas para deslocamentos negativos. Com a junção do potencial harmónico teremos de procurar um equilíbrio entre os dois potenciais. Na figura 2 encontram-se mais uma vez representadas as trajetórias do sistema no espaço de fases para um determinado valor da constante de α . Apresentam-se também as curvas de potencial associadas a diversos valores deste parâmetro. Como observamos facilmente, o sistema apenas possui trajetórias fechadas para valores perto do ponto de equilíbrio ($p = q = 0$) e que quando o sistema se afasta demasiado deste, a sua trajetória torna-se aberta e se desloca no sentido de $q < 0$. No gráfico da direita, a nossa intuição física é comprovada pois para valores mais baixos de α , o potencial é quasi-harmónico, mas quando o seu valor se torna comparável com o de k , a posição de equilíbrio torna-se instável e o termo não linear passa a dominar a dinâmica do sistema.

Do ponto de vista computacional, foi criada uma grelha de condições iniciais e deixou-se o sistema evoluir durante algum tempo de cada uma dessas, obtendo assim troços das trajetórias do sistema. Juntando todas as trajetórias obtidas, temos o esboço apresentado ficando com uma ideia do comportamento do sistema para quaisquer condições iniciais.

O facto de se ter procedido deste modo deve-se à pouca documentação referente à construção de diagramas deste género de maneira rápida, eficiente e intuitiva. Obtemos no entanto uma óptima ideia do tipo de trajetórias que o sistema realizará no espaço de fases ¹.

Por fim acrescentamos o último termo do potencial. Ao contrário do potencial do tipo α , o potencial β , devido à sua paridade, levará sempre a órbitas fechadas pois o potencial β dominará sempre a dinâmica do sistema quando este se afaste da posição de equilíbrio. Em relação a esta, temos agora não o equilíbrio entre dois, mas sim três potenciais. Como observamos no mapa apresentado na figura 4 temos portanto dois pontos de equilíbrio para algumas combinações dos parâmetros não harmónicos.

A Cadeia de Fermi Pasta Ulam

Tendo agora uma ideia de como se comporta um único oscilador não harmónico, prossigamos com o estudo da ca-

¹Caso não seja do agrado do leitor a implementação, aconselhamos a apreciação puramente estética do retrato do espaço de fases do sistema

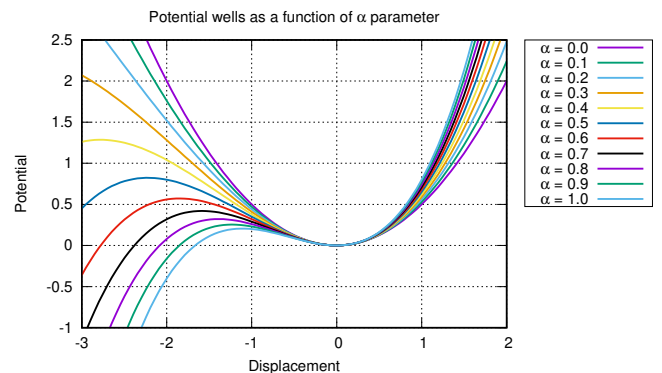
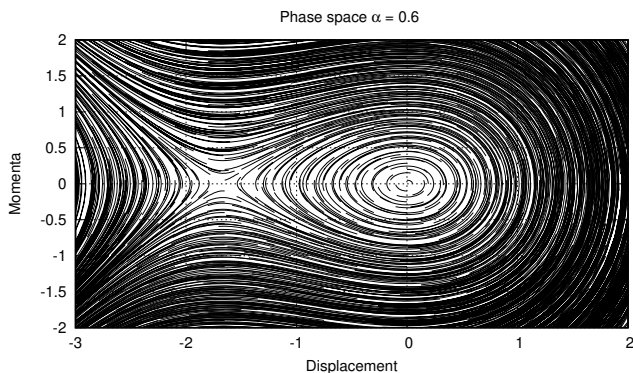


Figura 2: **Esquerda:** trajetórias do sistema no espaço de fase associadas a um valor de α de 0.6 . **Direta:** Curvas de potencial para diferentes valores do parâmetro α . Observa-se que, para valores grandes deste parâmetro, deixa de existir um ponto de equilíbrio.

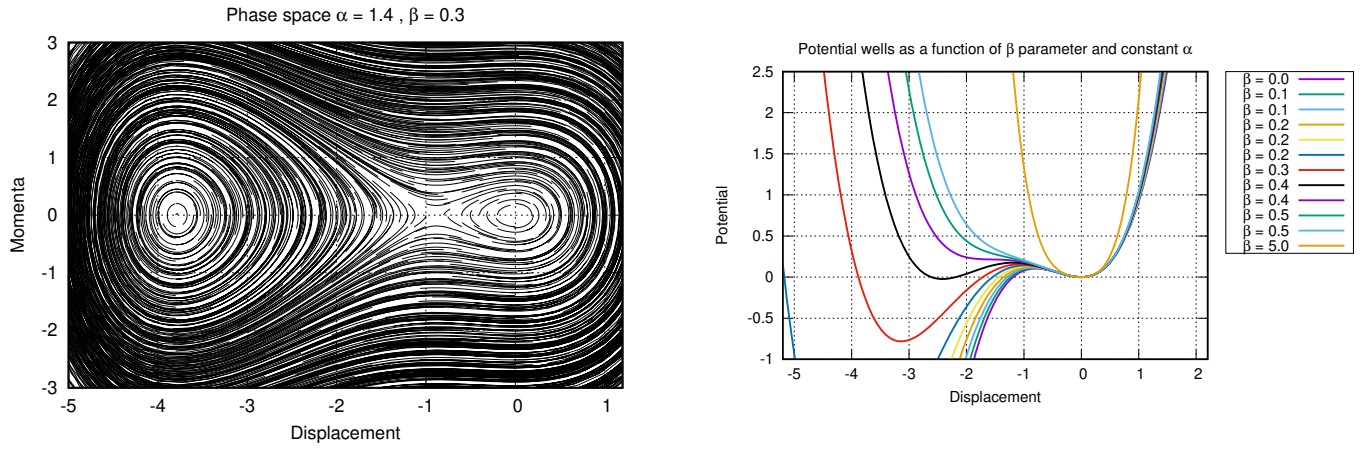


Figura 4: **Esquerda:** Trajectórias do sistema no espaço de fase associadas a um valor de α de 1.4 e β de 0.3. **Direita:** Curvas de potencial para diferentes valores do parâmetro β para o mesmo valor de α de 1.4. Observe-se a existência de pelo menos um ponto de equilíbrio estável para qualquer combinação dos parâmetros

deia do problema original que nos propusemos a estudar. Tentou-se reproduzir a experiência o mais correctamente possível de modo a poder comparar os resultados obtidos. Começou-se então por colocar uma configuração de posições iniciais sinusoidal. Começando com 32 massas no primeiro modo normal de oscilação deixou-se a iteração correr durante algum tempo de modo a registar o comportamento do sistema. Gravando as posições, momentos e energias associadas conseguimos obter uma representação animada do movimento da cadeia e o conhecimento da evolução e transferência de energia entre os modos de oscilação do sistema. Aconselha-se a visualização do vídeo que acompanha o código para um melhor entendimento da explicação subsequente.

Realizou-se a primeira a simulação somente com uma perturbação do tipo α . A energia em cada um dos 5 primeiros modos de oscilação encontra-se apresentada na figura 6.

Observamos então o já referido na primeira secção - o paradoxo de FPU. No início da simulação, a energia presente no primeiro modo normal parece de facto ser redistribuída pelos restantes modos. No entanto, após algum tempo observamos picos de energia em modos sucessivamente menores e por fim um reverter deste processo culminando este na restauração das condições iniciais do sistema.

O mesmo se observa na figura 5 onde apenas se introduziu uma perturbação do tipo β . Ao realizar esta simulação, não podemos deixar de notar que a energia não retorna com-

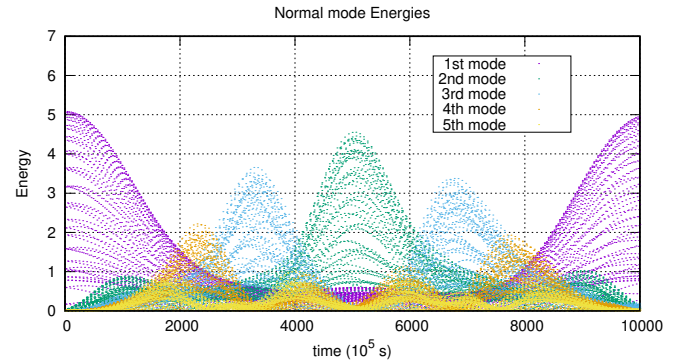


Figura 6: Energia em cada um dos modos normais de oscilação para um parâmetro α de 0.25 ao longo do tempo

pletamente ao modo de frequência mais baixa nos primeiros ciclos. Somos então levados a prolongar a simulação por mais ciclos deste fenómeno de recorrência observado. Ao realizar esta simulação vemos então que a energia, para longos períodos temporais é de facto redistribuída pelos modos normais. No entanto, o paradoxo continua por resolver pois mesmo aquando da estabilização das energias dos modos normais, a permutação de energias continua a ocorrer de modo cíclico. O estudo aprofundado deste processo de termalização está para além deste trabalho, no entanto, com o intuito de observar estatisticamente se este processo de facto

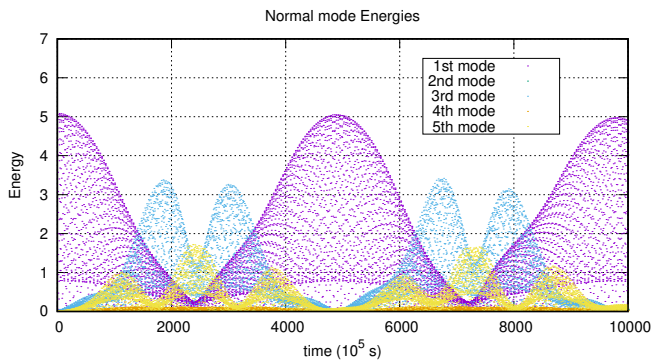
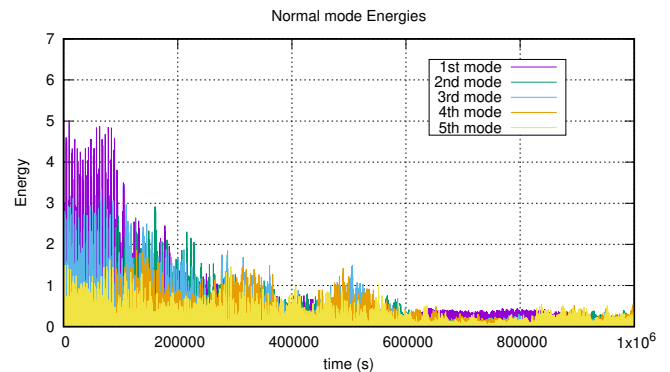


Figura 5: Evolução temporal da energia dos modos de oscilação do oscilador não harmónico do tipo- β com $\beta = 8.25$ com escalas temporais diferentes. Consegue-se observar o fenómeno de termalização do sistema



ocorria, realizou-se a simulação mais uma vez.

Utilizou-se desta vez uma cadeia com 128 osciladores, inicializando as suas posições no modo normal mais baixo como no exemplo anterior. O facto de termos mais pontos permite uma amostragem melhor da distribuição de momentos. Usando por base a definição estatística de temperatura criaram-se os histogramas apresentados na figura 7 onde se apresenta a distribuição por frequência do quadrado do momento das partículas da cadeia para o tempo inicial, para um tempo intermédio e para o tempo final da simulação. Inicialmente, procurámos inicializar o sistema com todas as massas nas posições de equilíbrio e com um momento inicial aleatório, no entanto, devido ao tipo de geradores aleatórios das bibliotecas de C++, a distribuição não era de todo aleatória fornecendo uma distribuição do tipo gaussiana centrada em zero. Optou-se então pela inicialização tradicional do problema. Como podemos observar pelos histogramas apresentados, os momentos das partículas tendem de facto para uma distribuição não aleatória e com o pico muito perto do zero o que pode indicar que há um processo de distribuição da energia pelas partículas semelhante ao que observamos na termalização de um sistema.

Será interessante realizar um estudo da distribuição das velocidades para diversos parâmetros α e β com um maior número de massas e observar se de facto existe uma distribuição característica destas permitindo, em caso afirmativo, obter uma estimativa da temperatura própria do sistema.

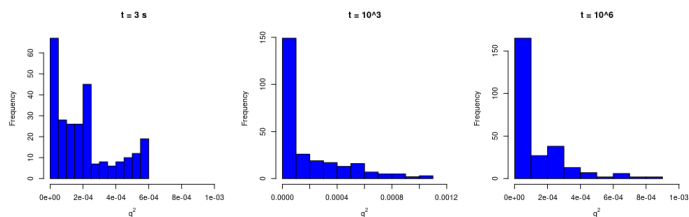


Figura 7: Distribuição do quadrado das velocidades para a simulação do oscilador tipo β . O Histograma foi construído com base na regra de *Sturges* para as subdivisões dos intervalos de ocorrência.

Ondas em cadeias não lineares

Como proposto na introdução, comparamos agora cadeias lineares e não lineares como transportadoras de onda. Para tal, aumentamos o número de massas e colocamos na cadeia a solução de uma onda a propagar-se numa cadeia linear.

Efectuamos primeiro a simulação para uma cadeia de facto linear e depois para uma com parâmetros de enarmonicidade não nulos. Como podemos facilmente constatar na figura 8, observamos que para a cadeia linear a onda se propaga sem qualquer tipo de deformação. Por outro lado, na cadeia não-linear, vemos que a onda inicialmente gaussiana começa por se tornar estreita e com uma frente praticamente vertical. Ao chegar a este ponto a onde 'parte-se' em várias outras mais pequenas que se continuam a propagar na mesma direcção e sem aparentemente alterar a sua forma - possíveis solitões. Este comportamento é característico das soluções da equação de Korteweg-de Vries como podemos observar por exemplo em [3] na animação apresentada. É no entanto aqui que o meu conhecimento escasso nesta área não me permite, por um lado, analisar correctamente o com-

portamento do sistema, por outro, gerar condições iniciais propícias a observar fenómenos teóricos conhecidos.

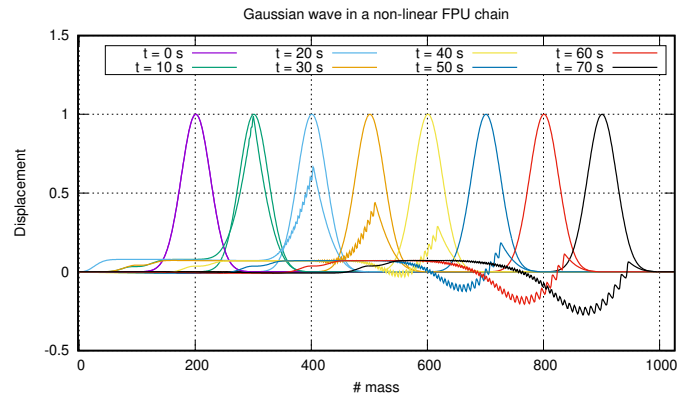


Figura 8: Evolução temporal da propagação de uma onda gaussiana numa cadeia linear e numa cadeia não-linear do tipo β

Conclusão

Para a realização deste projecto foi escolhido um tópico que, à primeira vista inofensivo - por ignorância - se revelou um tema bastante avançado e de difícil acesso. No entanto, a motivação da realização do mesmo era aplicar e desenvolver novas técnicas de programação no contexto da Mecânica Analítica pelo que penso ter sido alcançado este objectivo. Outra motivação era o estudo de um tópico novo e diferente dos normalmente abordados durante o percurso de licenciatura, visando assim abrir horizontes sobre temas de investigação actuais e futuros.

Do ponto de vista da implementação, o código encontra-se preparado para uso mais regular no estudo dos tópicos referidos, tendo a capacidade para realizar um estudo realmente sério sobre o assunto. As maiores dificuldades deram-se na aprendizagem da utilização da biblioteca utilizada para a resolução das equações do movimento e também na procura da melhor representação gráfica dos fenómenos observados. Para a representação gráfica dos resultados utilizou-se o software *gnuplot* e '*R*', sendo este último utilizado para as análises estatísticas.

O tópico das cadeias de Fermi-Pasta-Ulam é de facto um tópico profundamente estudado pela comunidade científica hoje, apesar de ser algo conhecido desde a década de 50. Como podemos constatar por [2], o tópico relaciona-se com muitos outros do mundo da investigação contemporânea.

Referências

- [1] J. Pasta E. Fermi and S. Ulam. Studies of nonlinear problems. 1955.
- [2] Joseph Ford. The fermi-pasta-ulami problem: Paradox turns discovery. *Physics Letters*, 1992.
- [3] Wikipedia. Korteweg-de vries equation.
- [4] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal. Interaction of "solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.*, 15:240-243, Aug 1965.