

CLMC - Cadeia Linear de Massas Correlacionadas

I.F.F. dos SANTOS*

18 de agosto de 2021

RESUMO

Este texto explica o modelo matemático dos sistemas que o programa CLMC é capaz de simular, além de fornecer instruções sobre como usar o programa. Devo explicar que este é um programa didático e espero que sirva de consulta para aqueles que pretendem escrever um programa para simular um sistema físico onde o principal desafio é resolver equações diferenciais. Me esforcei para que o programa seja portátil de modo que para o usar basta possuir algum compilador compatível com a versão publicada em 1999 da linguagem de programação C, carinhosamente chamada de C99. Para além das bibliotecas padrão do C99 o programa conta com uma cópia da biblioteca libdamiao,^[1] que é compilada junto com o programa.

1 INTRODUÇÃO

Sejam uma cadeia linear (clássica) com N partículas, q_n o quanto a n -ésima partícula se afastou de sua posição de equilíbrio e p_n seu respectivo momento linear, sua energia cinética é $\frac{p_n^2}{2m_n}$, onde m_n é a sua massa. Agora suponha que a partícula está sujeita a um potencial proporcional ao quadrado da distância entre ela e suas vizinhas da forma $\frac{1}{4}[\eta_{(2,n-1)}(q_n - q_{n-1})^2 + \eta_{(2,n)}(q_{n+1} - q_n)^2]$, onde $\eta_{(2,n)} > 0$ é um termo de acoplamento, este potencial pode ser identificado com a *lei de Hooke*, isto é, a força que as partículas exercem umas sobre as outras é similar à força que uma mola exerce (como se estivessem presas umas às outras por molas). Generalizando este conceito para potenciais com o cubo e a quarta potencia temos finalmente a energia de uma partícula dada por

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m_n} + \sum_{i=2}^4 \frac{1}{2i} [\eta_{(i,n-1)}(q_n - q_{n-1})^i + \eta_{(i,n)}(q_{n+1} - q_n)^i] \quad (1)$$

Dessa forma o sistema é conservativo e sua energia total é dada pelo hamiltoniano $H = \sum_{n=1}^N E_n$. A partir desse hamiltoniano é possível escrever as equações de movimento para o sistema, dadas pelas equações de Hamilton

$$\frac{d}{dt}q_n = \frac{p_n}{m_n} \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt}p_n = \sum_{i=2}^4 \eta_{(i,n)}(q_{n+1} - q_n)^{i-1} - \eta_{(i,n-1)}(q_n - q_{n-1})^{i-1} \quad (3)$$

Dessa forma o objetivo principal do programa CLMC é encontrar uma solução numérica para as equações de Hamilton, isto é, encontrar os valores das funções $q_n(t)$ e $p_n(t)$ do tempo t . Por padrão o programa CLMC considera como condição inicial (no tempo $t = 0$) que $q_n(0) = 0$ e $p_n(0) = m_n v_0 \delta_{(n,N/2)}$ onde $\delta_{(i,j)}$ é

*ismael.santos@fis.ufal.br, Grupo de Propriedades de Transporte em Sistemas de Baixa Dimensionalidade.

o delta de Kronecker e v_0 é a velocidade inicial da partícula no meio da cadeia, isso equivale a injetar energia cinética no sistema, inicialmente em equilíbrio dinâmico, e resolver as equações nos permite estudar como a anergia se espalha e como viaja pela cadeia.

Também é importante saber descrever os extremos da cadeia, o programa CLMC considera que não há nenhuma interação da primeira e da última partícula com o exterior, isso é modelado fazendo $q_0 = q_{N+1} = \eta_{(i,0)} = \eta_{(i,N)} = 0$.

2 PARÂMETROS

O sistema físico, tal como foi apresentado na introdução, possui vários parâmetros dos quais depende a interação e a propagação de energia injetada na cadeia, mais especificamente, os parâmetros são as massas das partículas e os termos de acoplamento.

Por padrão o programa CLMC considera que os termos de acoplamento são os mesmo para todas as partículas, dependendo somente do tipo de potencial, isto é, $\eta_{(i,n)} = \eta_i$.

Quanto às massas, seus valores são definidos com base em um dos seguintes métodos:

- Correlações construídas com uma série de Fourier: A série é

$$V_n = \sum_{i=1}^{N/2} i^{-0.5\alpha} \cos\left(\frac{2\pi ni}{N} + \Phi_i\right) \quad (4)$$

Onde $\Phi_i \in [0, 2\pi)$ são números pseudo-aleatórios e $\alpha \geq 0$ é um parâmetro que controla o quão correlacionada é a série. A partir dessa serie definimos as massas como

$$m_n = \begin{cases} M_1 & \text{se } V_n < -r_1 \\ M_2 & \text{se } -r_1 < V_n < r_2 \\ M_3 & \text{se } r_2 < V_n < r_3 \\ M_4 & \text{se } V_n > r_3 \end{cases} \quad (5)$$

Para algum conjunto de valores $0 < r_2 < r_1 < r_3$.

- Correlações construídas com uma outra série: A série é

$$V_n = \sum_{i=1}^N \frac{\Phi_i}{\left(\frac{|i-n|}{\alpha} + 1\right)^2} \quad (6)$$

Onde $\Phi_i \in [-1, 1)$ são números pseudo-aleatórios e $\alpha > 0$ é um parâmetro que controla o quão correlacionada é a série. A partir dessa série definimos as massas como

$$m_n = \begin{cases} M_1 & \text{se } V_n < -r \\ M_2 & \text{se } -r < V_n < r \\ M_3 & \text{se } V_n > r \end{cases} \quad (7)$$

Para algum valor $r > 0$.

- Correlações construídas com um mapa de Bernoulli: Essa é uma sequência iterativa de números iniciada com $V_0 = \Phi$ onde $\Phi \in [0, 1)$ é um número pseudo-aleatório, a sequência é

$$V_n = \begin{cases} V_{n-1} + 2^{\alpha-1} (1-2b) V_{n-1}^\alpha + b & \text{se } 0 \leq V_{n-1} < 0.5 \\ V_{n-1} - 2^{\alpha-1} (1-2b) (1-V_{n-1})^\alpha + b & \text{se } V_{n-1} \geq 0.5 \end{cases} \quad (8)$$

Onde, por padrão, $b = 10^{-12}$ e $\alpha \geq 0$ é um parâmetro que controla o quão correlacionada é a sequência. A partir dessa sequência definimos as massas como $m_n = M_0 + V_n$ onde $M_0 > 0$ é uma constante pequena introduzida com o objetivo de evitar massas nulas.

Note que todas as maneiras de gerar correlações utilizam um parâmetro α , o fator de correlação, de forma que o primeiro estudo que vem à mente é verificar como a energia inserida se propaga em diferentes sistemas com diferentes fatores de correlação. Note também que não há grandes dificuldades em alterar o programa original para que ele também trabalhe com termos de acoplamento correlacionados.

3 MEDIDAS DE LOCALIZAÇÃO

Tenho dito que a velocidade inicial v_0 que colocamos no centro da cadeia é uma energia cinética que injetamos e o programa resolve as equações de Hamilton com o objetivo de estudar como a energia se propaga na rede. Pois bem, como $H(0)$ é a energia total disponível na cadeia então a fração f_n dessa energia que está na n -ésima partícula no tempo t é dada por

$$f_n(t) = \frac{E_n(t)}{H(0)} \quad (9)$$

a partir daí podemos definir σ como a quantidade que mede o quanto a energia se espalhou na cadeia, essa quantidade é o deslocamento médio quadrático definido por

$$\sigma(t) = \left(\sum_{n=1}^N \left(n - \frac{N}{2} \right)^2 f_n(t) \right)^{1/2} \quad (10)$$

finalmente, irei definir Z como a quantidade cujo o inverso estima quantas partículas contribuem para o transporte de energia e é dada por

$$Z(t) = \sum_{n=1}^N f_n^2(t) \quad (11)$$

4 AS FUNÇÕES DO CLMC

O programa CLMC sorteia os números pseudo-aleatórios usando a função `random` da biblioteca `libdamiao`. Todas as demais funções utilizadas ou são padrão do C99 ou são funções do próprio programa CLMC. As funções que preparam o sistema físico são:

- `void __massas(int semente);` — Executa a função que gera um conjunto de valores correlacionados, conforme o método e fator de correlação configurados no arquivo `CLMC_config`, e depois define todas as massas da cadeia. `semente` é um número positivo que servirá de base para inicializar o gerador de números pseudo-aleatórios.
- `void __posicoes(void);` — Zera a posição inicial de cada partícula.
- `void __momentos(void);` — Zera o momento inicial de cada partícula, exceto o da partícula do meio, localizada no sítio $N/2$, que deve ser igual à sua respectiva massa vezes uma velocidade inicial cujo valor é configurado no arquivo `CLMC_config`.
- `void __acoplamentos(void);` — Para cada tipo de potencial (quadrático, cúbico ou quártico) iguala os termos de acoplamentos de todas as partículas, o valor do termo de acoplamento para cada potencial é definido no arquivo `CLMC_config`.

Após executar as funções acima o programa CLMC calcula a energia total do sistema, antes de executar os métodos de solução das equações de Hamilton.

REFERÊNCIAS

- 1 I.F.F. dos SANTOS. *libdamiao*. 2021. Disponível em: <https://github.com/ismaeldamiao/libdamiao>.