



CLMC - Cadeia Linear de Massas Correlacionadas

Ismael Felipe Ferreira dos Santos

Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Física

Sumário

1 Introdução

2 Modelo e formalismo

3 Resolução



Introdução

Este programa calcula a dinâmica dos modos de vibração em uma cadeia linear (unidimensional), calcula medidas de localização da energia na cadeia.

É possível resolver o ****problema de valor inicial**** com diversos metodos iterativos e, em casos particulares, é possível encontrar os modos normais de vibração e as autofrequências.

Modelo

Sejam x_n a posição em relação à própria posição de equilíbrio (grau de liberdade 1) da massa M_n localizada no sítio n e P_n seu momento, com $n = 1, \dots, N$ então a energia da massa no sítio n é

$$E_n = \frac{P_n^2}{2M_n} + \sum_{i=2}^4 \frac{1}{2i} \left[\eta_{i,n}(x_n - x_{n-1})^i + \eta_{i,n+1}(x_{n+1} - x_n)^i \right] \quad (1)$$

E o hamiltoniano do sistema fica

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N E_n \quad (2)$$

Onde os fatores $\eta_{i,n}$ são termos de acoplamento. Por exemplo, se $\eta_{3,n} = \eta_{4,n} = 0 \forall n$ então só resta o potencial harmônico, cujo gradiente dá a lei de Hooke.

Problema de valor inicial

Condição inicial 1

O programa CLMC considera como condição inicial $x_n = 0$ e $P_n = M_n \delta_{n,N/2}$ para todo n .

Para customizar a condição inicial 1 modifique o arquivo **CLMC_PVI.c**.

Condição inicial 2

O programa CLMC considera como condição inicial $\eta_{i,n} = \eta_i$ com os três valores η_2 , η_3 e η_4 definidos no arquivo de configuração. Por padrão $\eta_i = 1$ para todo i .

Para customizar a condição inicial 2 modifique o arquivo **CLMC_PVI.c**.

Condição inicial 3

O programa CLMC escolhe as massas com base em séries e mapas de números pseudo-aleatórios correlacionados. O parâmetro α mede se a correlação é fraca ou forte.

Para customizar a condição inicial 3 modifique o arquivo **CLMC_correlacoes.c**.

Condição inicial 3 -

A série correlacionada é

$$V_n = \sum_{i=1}^{N/2} \frac{1}{i^{\alpha/2}} \cos\left(\frac{2\pi ni}{N} + \Phi_i\right) \quad (3)$$

Onde $\Phi_i \in [0, 2\pi)$ são números aleatórios gerados com a função `ran1` (ver arquivo **ran1.c**) do *Numerical Recipes*.

Uma vez calculada a série, o mapeamento das massas é feito com o seguinte critério

$$M_n = \begin{cases} m_1 & \text{se } V_n < -r_1 \\ m_2 & \text{se } -r_1 < V_n < r_2 \\ m_3 & \text{se } r_2 < V_n < r_3 \\ m_4 & \text{se } V_n > r_3 \end{cases} \quad (4)$$

Por padrão $m_1 = 0.5$, $m_2 = 1.0$, $m_3 = 1.5$ e $m_4 = 2.0$ (**CLMC_correlacoes.c**).

Condição inicial 3 -

A série correlacionada é

$$V_n = \sum_{i=1}^N \frac{\Phi_i}{\left(\frac{|i-n|}{\alpha} + 1\right)^2} \quad (5)$$

Onde $\Phi_i \in [-1, 1)$ são números aleatórios gerados com a função `ran1` (ver arquivo **ran1.c**) do *Numerical Recipes*.

Uma vez calculada a série, o mapeamento das massas é feito com o seguinte critério

$$M_n = \begin{cases} m_1 & \text{se } V_n < -r \\ m_2 & \text{se } -r < V_n < r \\ m_3 & \text{se } V_n > r \end{cases} \quad (6)$$

Por padrão $m_1 = 0.5$, $m_2 = 1.0$ e $m_3 = 1.5$ (**CLMC_correlacoes.c**).

Condição inicial 3 - Mapa de Bernoulli

Sendo $\Phi \in [0, 1)$ um número aleatório gerado com a função `ran1` (ver arquivo **ran1.c**) do *Numerical Recipes*. O mapeamento das massas é feito com o mapa de Bernoulli

$$M_n = \begin{cases} M_{n-1} + 2^{\alpha-1} (1 - 2b) M_{n-1}^\alpha + b & \text{se } 0 \leq M_{n-1} < 0.5 \\ M_{n-1} - 2^{\alpha-1} (1 - 2b) (1 - M_{n-1})^\alpha + b & \text{se } M_{n-1} \geq 0.5 \end{cases} \quad (7)$$

onde $M_{n-1} = \Phi$ quando $n = 1$. Por padrão $b = 10^{-12}$.

Para evitar massas nulas faz-se

$$M_n = M_n + M_0 \quad (8)$$

Por padrão $M_0 = 0.5$ (**CLMC_correlacoes.c**).

Por padrão o programa CLMC usa a série 1 com $\alpha = 1.0$.

Medidas de localização

Fração da energia total localizada na massa M_n :

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

Dispersão da energia na rede:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 f_n} \quad (10)$$

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

$1/Z$ estima o número de massas sobre as quais a energia de vibração conseguiu se propagar.

Equações de Hamilton

As equações de Hamilton para o hamiltoniano do sistema dão

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}x_n = \frac{P_n}{M_n} \\ \frac{d}{dt}P_n = \sum_{i=2}^4 \eta_{i,n+1}(x_{n+1} - x_n)^{i-1} - \eta_{i,n}(x_n - Q_{n-1})^{i-1} \end{cases} \quad (12)$$

Oscilador harmônico - Formalismo

Para o caso de $\eta_{3,n} = \eta_{4,n} = 0 \forall n$ a 2ª lei de Newton dá

$$M_n \ddot{x}_n = \eta_{2,n+1}(x_{n+1} - x_n) - \eta_{2,n}(x_n - x_{n-1}) \quad (13)$$

Supondo uma solução da forma $x_n = A_n \cos(\omega t)$ temos

$$-M_n \omega^2 x_n = \eta_{2,n+1}(x_{n+1} - x_n) - \eta_{2,n}(x_n - x_{n-1}) \quad (14)$$

$$\omega^2 x_n = -\frac{\eta_{2,n}}{M_n} x_{n-1} + \frac{\eta_{2,n} + \eta_{2,n+1}}{M_n} x_n - \frac{\eta_{2,n+1}}{M_n} x_{n+1} \quad (15)$$

Tomando $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ e

$$T = \begin{bmatrix} \frac{\eta_{2,1} + \eta_{2,2}}{M_1} & -\frac{\eta_{2,2}}{M_1} & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\eta_{2,2}}{M_2} & \frac{\eta_{2,2} + \eta_{2,3}}{M_2} & -\frac{\eta_{2,3}}{M_2} & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{\eta_{2,3}}{M_3} & \frac{\eta_{2,3} + \eta_{2,4}}{M_3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -\frac{\eta_{2,N}}{M_{N-1}} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\eta_{2,N}}{M_N} & \frac{\eta_{2,N}}{M_N} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Oscilador harmônico - Formalismo

Chegamos, finalmente, à equação de autovalores e autovetores

$$\omega^2 |\vec{x}\rangle = T |\vec{x}\rangle \quad (17)$$

onde ω são as autofrequencias e \vec{x} os modos normais de vibração. T será diagonalizada usando a rotina **tqli** (ver **tqli.c**) do *Numerical Recipes* uma vez que T é tridiagonal.

Runge-kutta Clássico de 4ª Ordem

Para o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}f(x) = F(x, f(x)) \\ f(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (18)$$

O método RK4 é dado por:

$$f(x_0 + dx) = f(x_0) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) dx \quad (19)$$

Onde:

$$\begin{cases} k_1 = F(x_0, f(x_0)) \\ k_2 = F(x_0 + 0.5 dx, f(x_0) + 0.5k_1 dx) \\ k_3 = F(x_0 + 0.5 dx, f(x_0) + 0.5k_2 dx) \\ k_4 = F(x_0 + dx, f(x_0) + k_3 dx) \end{cases} \quad (20)$$