

## Projecto de Física Computacional (2021-22, 2º semestre/P3)

### Entrega do Projecto

Até às 22H de dia 24 de Abril de 2022 através do svn, **única e exclusivamente**.

Não se esqueçam de fazer `commit` de todos ficheiros com excepção dos ficheiros `*.o*.exe`

A operação `svn status` permite identificar os ficheiros ainda não `committed` ou que não estejam ainda sob controlo de svn.

### Organização das pastas de trabalho

Em cada grupo, foi criada a pasta **projecto** que contém a seguinte estrutura de pastas e ficheiros (não se esqueçam de começar por fazer `svn update`) cuja finalidade está descrita à direita entre parêntesis:

<code>projecto/src</code>	.....	[user classes]
<code>/main</code>	.....	[main programs]
<code>/bin</code>	.....	[object files, executables]
<code>projecto.pdf</code>	.....	[enunciado <b>do</b> projecto]

De notar:

- Os programas principais que realizarem devem estar na pasta `main/`
- As classes (ficheiros “header” e “source”) desenvolvidas pelo grupo e necessárias à resolução deste projecto, devem estar na pasta `src/`

### Correcção e Cotação

A resolução do projecto implicará a entrega:

- dos códigos C++ realizados (classes e programas)
- do relatório de síntese do projecto, cujo nome deve ser `relatorio_XXX.pdf` (onde XXX é a identificação do grupo, pr exemplo A01), devem obrigatoriamente constar a identificação dos elementos do grupo que participaram na realização do projecto

Não usar acentos nos nomes dos ficheiros

XXX deve designar o grupo (por exemplo, A01)

O relatório pode ser escrito em `word` por exemplo, mas deve ser convertido para formato pdf

O relatório do projecto, deve:

- ser redigido em português
- possuir um máximo de 5 páginas
- possuir um tamanho de letra mínimo de 11
- deve responder explicitamente às questões apresentadas no enunciado
- deve conter os resultados, comentários a estes quando adequado e todas as informações que considerem essenciais para a compreensão dos resultados que apresentam
- deve conter as figuras solicitadas explicitamente
- pode possuir outras análises adicionais que considerem relevantes, dentro do limite de páginas

Aspectos que serão tidos em conta na correcção do projecto:

- clareza e comentários do código C++ (10%)
- estrutura do código C++ implementado (15%)
- resultados: execução dos programas e relatório (75%)

O projecto terá que ser entregue até às 22H do dia 24 de Abril. Caso existam entregas posteriores às 22H05 (atrasos superiores a 5 minutos de tolerância), a regra de desconto em valores [0,20] que será aplicada à nota do projecto será a seguinte:

$$D = T * 0.1$$

$D$ : desconto em valores [0,20]

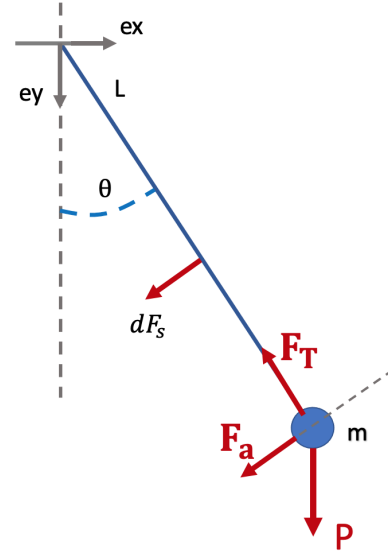
$T$ : tempo de atraso de entrega em minutos, contado a partir das 22H05 (fim da tolerância)

Exemplo de desconto: 10 min de atraso (1 val), 20 min (2 val), ...

## Enunciado

### Pêndulo gravítico com atrito

Um exemplo clássico de movimento harmónico simples é o do pêndulo, que consiste numa massa  $m$  ligada a um fio de massa desprezável e comprimento  $\ell$  que pode oscilar em torno de um ponto de suspensão. Para uma correcta descrição do movimento do pêndulo, necessitamos de identificar as forças aplicadas a este. Na figura ao lado encontram-se representadas as forças que actuam sobre o pêndulo. Optou-se pela não representação da força que actua sobre o fio no ponto de suspensão (simétrica da força de tensão que actua sobre o fio na extremidade em que este está ligado à massa), por não ter relevância para a solução do problema. Podemos ver que existe a força gravítica, as forças de atrito que resultam do movimento ( $v \neq 0$ ) e que se opõem a este e ainda a força de tensão do fio.



Listam-se de seguida as forças representadas na figura:

- a força Peso aplicada sobre a massa  $m$ :  $\vec{P} = mg\vec{e}_y$
- a força de atrito aplicada sobre a massa  $m$ :  $\vec{F}_a$
- a força de atrito aplicada sobre o fio de comprimento  $\ell$ :  $d\vec{F}_s$
- a tensão no fio:  $\vec{F}_T$

A equação do movimento para um corpo em rotação, pode ser derivada a partir da análise dos momentos das forças ( $\vec{N}_i$ ) aplicadas em relação ao ponto de suspensão ( $\vec{N}_i = \vec{r}_i \times \vec{F}_i$ ):

$$\sum_i \vec{N}_i = I \frac{d^2\theta}{dt^2} \equiv I\ddot{\theta} \quad (1)$$

sendo  $I = m\ell^2$  o momento de inércia da massa  $m$ .

A força de atrito aplicada sobre um corpo que se desloca num fluido (o ar neste caso), para velocidades de deslocação suficientemente baixas, é proporcional à velocidade do corpo:  $\vec{F}_a \propto -\vec{v}$ . A constante de proporcionalidade dependerá da forma do corpo e da sua secção transversa.

Assim, a força de atrito aplicada sobre a massa esférica, será dada por:  $\vec{F}_a = -\kappa_1 \vec{v}$ , onde  $\kappa_1$  é uma constante.

A força de atrito aplicada ao longo do fio será também proporcional à velocidade da secção do fio,  $\vec{v} = r\dot{\theta}$  e à sua secção transversa  $dS = Ddr$  ( $D$ , diâmetro do fio), sendo dada por,

$$dF_s = -\kappa_2 D r \dot{\theta} dr$$

onde  $r$  é a distância do elemento do fio ao ponto de suspensão e  $\kappa_2$  uma constante.

Calculando então os momentos das várias forças em relação ao ponto de suspensão, e somando-os, pode-se obter a seguinte equação do movimento do pêndulo,

$$m\ell^2\ddot{\theta} + C\dot{\theta} + mg\ell \sin \theta = 0 \quad (2)$$

### [15 valores]

1. Com as técnicas aprendidas em Física Computacional, a resolução da equação diferencial de segunda ordem não-linear (2) pode ser realizada numericamente, tornando possível o seu estudo em qualquer regime de oscilação. Este projecto visa o estudo da oscilação do pêndulo com atrito.

Dados numéricos do pêndulo:

$\ell = 260$  cm (comprimento do fio)

$m = 500$  gr (massa)

$g = 9.81$  m/s<sup>2</sup> (aceleração da gravidade)

- a) Transforme a equação do movimento do pêndulo na forma,

$$\ddot{\theta} + \kappa_f \dot{\theta} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = 0 \quad (3)$$

Determine a expressão de  $\kappa_f$ .

- b) Escreva a equação do movimento (3) na sua forma adimensional.

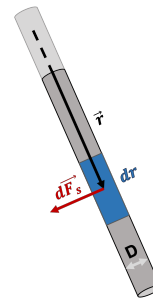
De forma a otimizar a sua solução numérica, determine a equação do movimento na sua forma adimensional, tendo em conta as seguintes relações,

$$\begin{aligned} t &= t_c \hat{t} \\ \theta &= \theta_c \hat{\theta} \\ \dot{\theta} &= \dot{\theta}_c \hat{\dot{\theta}} \end{aligned}$$

Determine as expressões dos factores de escala  $t_c, \theta_c, \dot{\theta}_c$ .

- c) Resolução da equação diferencial adimensional de segunda ordem.

Reduza a equação diferencial de 2a ordem adimensional a um conjunto de equações diferenciais adimensionais de 1a ordem.



Para a resolução da equação diferencial deve usar o método Runge-Kutta de ordem 4.

Os pontos solução da equação em cada instante de tempo possuirão a forma:  $(\hat{t}, \hat{x}_1, \hat{x}_2)$ , onde  $\hat{t}$  é o tempo adimensionalizado (sem dimensões) e as restantes, variáveis do problema adimensionalizadas.

Para armazenar os pontos solução utilize as classes desenvolvidas `ODEpoint` e `Xvar`, no esquema de herança proposto no *homework*.

Para resolver numericamente o problema desenvolva a class `ODEsolver`, cuja declaração incompleta se junta de seguida,

```
class ODEsolver {
public:
    ODEsolver(const vector<std::function<double(ODEpoint)>>&);
    (...)

    // setters
    SetInitialPoint(const ODEpoint&);

    // solvers
    const std::vector<ODEpoint>& RK4(double step, double Time);
    (...)

private:
    (...)
}
```

O construtor da classe `ODEsolver` recebe um vector com as funções do sistema de equações de primeira ordem que pretende resolver.

A solução da equação deve ser desenvolvida no programa principal `main/pendulum.C`

Para as respostas das questões que se seguem considere:

seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned}\theta(t=0) &= 70^\circ \\ \dot{\theta}(t=0) &= 0 \text{ rad/s}\end{aligned}$$

coeficiente de amortecimento:  $\kappa_f = 0.01 \text{ s}^{-1}$

tempo total de 200 segundos para o estudo da oscilação

### Obtenha:

- gráfico  $\theta(t)$
- gráfico  $\dot{\theta}(t).vs.\theta(t)$
- gráfico da energia total do pêndulo,  $E = T + V$ .  
Nota:  $T$ , energia cinética e  $V$  energia potencial gravítica (descreva como definiu a energia potencial gravítica).

- a expressão para a magnitude da força de tensão no fio ( $\vec{F}_T$ ) e o gráfico com a sua variação ao longo de 50 segundos.
- d) Obtenha o período da oscilação em função do tempo,  $T(t)$ , usando o vector de pontos solução. Realize o gráfico.
- Assumindo a conservação aproximada de energia em cada período, pode derivar a expressão do período da oscilação  $\tilde{T}$  em função da amplitude de oscilação (veja o problema 4.3.3 da série de problemas). Compare o período de oscilação assim obtido  $\tilde{T}(t)$  com o período da oscilação em função do tempo,  $T(t)$ . Realize um gráfico com a sobreposição dos dois períodos.
- e) A potência (energia por unidade de tempo) associada a uma força aplicada num sistema pode ser derivada como sendo,

$$Pot = \frac{dW}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}$$

Determine a energia dissipada pela força de atrito  $\vec{F}_a$  aplicada na massa, usando  $\kappa_1 = 0.5\kappa_f$ , ao fim de 50 segundos.

**[5 valores]**

2. O objectivo deste problema é simular e fazer análise de dados de uma experiência de pêndulo simples com atrito. Partindo da solução obtida anteriormente, iremos simular medidas do ângulo tendo em conta erros existentes na medição.

Admita que na experiência que estamos a simular, a medida do ângulo é efectuada com um intervalo de tempo de  $1/20$  segundos e que a simulação do ângulo medido ( $\theta_m$ ) pode ser obtida da seguinte forma:

$$\theta_m = \theta(t) + G(\mu = 0, \sigma = 0.05 * \theta(t))$$

em que:

- $\theta(t)$ , é o valor da amplitude angular da oscilação obtida na resolução numérica do problema feito em 1.
- $G$  é um número aleatório gerado com a biblioteca ROOT a partir da função gaussiana de média ( $\mu$ ) nula e largura ( $\sigma$ ) indicada.

O programa que desenvolver para resolver este problema deve possuir o nome `main/pendulum_medida.cpp`.

- a) Obtenha o conjunto de medidas  $(t, \theta)$  para 200 segundos de oscilação.

Realize um gráfico com as medidas em função do tempo para 50 segundos e analise as medidas construindo um outro gráfico com a sua dispersão relativa:  $\frac{\theta_m(t) - \theta(t)}{\theta(t)}$

- b) Desenvolva um método de ajuste de funções aos dados (*fit*) de forma a obtermos a partir das amplitudes de oscilação medidas o período da oscilação em função do tempo para um tempo total de 200 segundos.

**simulated annealing**

Para o ajuste de funções a dados propomos o uso do método de “simulated annealing” que deve o seu nome a uma técnica usada no aquecimento e posterior arrefecimento lento de sistemas físicos (redes cristalinas) de forma a atingir uma configuração estável e sem defeitos a que corresponde um mínimo absoluto de energia. Em 1953, três investigadores norte americanos (Metropolis, Rosenbluth, and Teller) [1] desenvolveram um algoritmo para simular o “annealing” dos cristais. O seu objectivo era reproduzir a evolução da estrutura física do material submetido ao “annealing”. O algoritmo é baseado em técnicas de Monte-carlo que consistem na geração de uma sequência de estados do sólido, da seguinte forma:

- Partindo de um estado inicial  $i$  de energia  $E_i$ , gera-se um novo estado  $j$  de energia  $E_j$  modificando ligeiramente a configuração do sistema
- Se a diferença de energia  $\Delta E = E_j - E_i$  é negativa (o novo estado possui uma energia menor) o estado  $j$  torna-se o estado corrente do sistema - *good move*. Se a

diferença de energia é maior ou igual a zero - *bad move*, aceitaremos esta transição com uma probabilidade dada por:

$$P = e^{-\frac{\Delta E}{\kappa_b T}}$$

onde  $T$  corresponde à temperatura do sólido e  $\kappa_b$  é a constante de Boltzman.

Este critério de transição entre estados é apelidado de critério de Metropolis e tem em conta que num sistema em equilíbrio à temperatura  $T$  a probabilidade de encontrar o sistema a uma dada energia  $E_i$  é dado por  $P \propto e^{-E_i/\kappa_b T}$  - probabilidade de Boltzman.

Esta técnica pode ser utilizada na optimização de funções - determinação do mínimo. Na técnica de “simulated annealing” o algoritmo de Metropolis é aplicado para gerar uma sequência de soluções no domínio dos estados do sistema. Para fazer isto, uma analogia é feita entre um sistema multi-partículas e o problema de optimização de funções, usando a seguinte equivalência: o conjunto de parâmetros da função a minimizar (função de custo) dá-nos a configuração do sistema e a função de custo representa a energia do sólido. Adicionalmente, é introduzido um parâmetro de controlo  $T$  ( $\kappa_b = 1$ ) que actua como uma temperatura no sistema físico.

No problema de ajuste dos dados a uma função modelo  $f(t; a, b, c, \dots)$  que envolve um conjunto de parâmetros  $a, b, c, \dots$ , é frequente definir a função de custo a optimizar como sendo a função dos mínimos quadrados, que é obtida somando as diferenças quadráticas entre as observações  $y_i$  e as previsões do modelo  $f(t_i; a, b, c, \dots)$

$$E(a, b, c, \dots) = \sum_i [y_i - f(t_i; a, b, c, \dots)]^2$$

sendo  $t_i$  os tempos das medições e  $f(t_i; a, b, c, \dots)$  a função do modelo a ajustar aos dados. A determinação do mínimo da função de custo  $E(a, b, c, \dots)$ , vai permitir determinar o conjunto dos parâmetros  $(\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \dots)$  que minimizam a função.

Na procura do mínimo, partimos de um estado do sistema definido por um conjunto de parâmetros quaisquer  $(a, b, c, \dots)_0$  e de uma temperatura inicial  $T_0$ , procedendo a uma evolução do sistema, através da modificação aleatória dos parâmetros e calculando a função de custo que daí resulta, e aplicando o critério de Metropolis.

Em termos genéricos o método passa por:

1. Definir um valor inicial para os parâmetros a ajustar  $(a, b, c, \dots)_0$  e para a temperatura inicial  $T_0$ .

Nota: A temperatura inicial elevada favorece a aceitação de “bad moves” do sistema (aumentos de energia), isto é, permite a exploração de um maior número de configurações no espaço dos parâmetros.

2. Gerar um novo estado com parâmetros  $(a', b', c', \dots)$  e verificar a variação da função de custo  $\Delta E = E(a', b', c', \dots) - E(a, b, c, \dots)$ . Aplicar o critério de Metropolis:



- caso a função de custo diminua ( $\Delta E < 0$ ), aceitar o conjunto de novos parâmetros
- senão aceitar o conjunto de novos parâmetros de acordo com a probabilidade,

$$P = e^{-\frac{E(a', b', c', \dots) - E(a, b, c, \dots)}{T}}$$

Nota: Para tomar a decisão de aceitação terá que gerar um número aleatório uniforme  $\in [0, 1]$  e compará-lo com a probabilidade  $P$  calculada

3. Passar o sistema para um novo equilíbrio através da diminuição lenta do parâmetro de controlo (temperatura)  $T$  e repetir o procedimento 2.

Nota: no algoritmo aqui proposto só é testada uma configuração do sistema para cada estado de equilíbrio (cada temperatura). Pode no entanto melhorar esta abordagem através da repetição da testagem a cada temperatura de equilíbrio.

### determinação do período de oscilação

Defina uma função  $f(t; a, b, c, \dots)$  que modelize a amplitude de oscilação e construa a função de custo respectiva,

$$E(a, b, c, \dots) = \sum_i [(\theta_m)_i - f(t_i; a, b, c, \dots)]^2$$

A minimização desta função de custo permite determinar o período da oscilação ao longo do tempo de oscilação do pêndulo (200 segundos).

Obtenha o período da oscilação em função do tempo,  $T_m(t)$  e represente-o graficamente.

Identifique claramente no relatório a função que utilizou, que parâmetros definiu e qual o valor dos parâmetros que minimizam a função.

Realize um gráfico com a função sobreposta aos pontos medidos.

## Bibliografia

- [1] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, The Journal of Chemical Physics. 21 (1953) 1087–1092. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.