

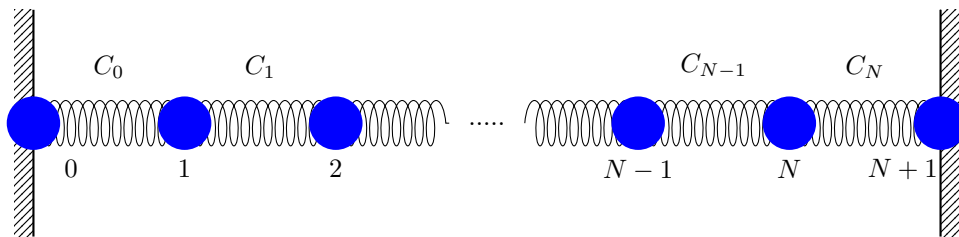
Simulación en Física: Vibración de una cadena lineal de masas puntuales.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

La vibraciones de una cadena lineal de masas y el cálculo de sus modos de vibración es un problema típico de la mecánica clásica y de la física del estado sólido. La posibilidad de obtener una solución analítica al problema esta supeditada a ciertas simplificaciones, como utilizar sistemas de pocos átomos(orden menor al número de Avogadro), átomos idénticos, átomos enlazados por enlaces de un mismo tipo. Sin embargo, su estudio para el caso general requiere de la utilización de herramientas numéricas.

Así pues, en este trabajo se estudiará la resolución numérica de los modos de vibración de una cadena lineal de masas puntuales unidas mediante muelles que cumplen la ley de Hooke y con las dos partículas de los extremos fijas como condiciones de contorno. De tal modo, se plantearán las ecuaciones de movimiento de cada partícula resultantes de considerar las leyes de Newton y se resolverán numéricamente partiendo de unas condiciones iniciales de desplazamiento respecto a la posición de equilibrio y velocidad para cada partícula.



De tal modo, en este trabajo nos serviremos de algunos de los métodos estudiados durante el año pasado en el curso de Física Computacional (como los métodos de Euler simple o de Euler mejorado) u otros nuevos presentados durante este curso de Simulación en Física (como los métodos de Euler-Cromer o de Verlet) para discretizar y resolver numéricamente las ecuaciones de movimiento, estudiando las trayectorias individuales de las partículas. Tras ello, trataremos de obtener las frecuencias de los modos de vibración, para lo cual haremos uso de la transformada de Fourier para buscar cualquier tipo de periodicidad en la evolución temporal del movimiento de nuestra partícula o de la velocidad de la misma.

Así, nuestro problema debe presentar consistencia con la Física pues es, al fin y al cabo, lo que estamos tratando de reproducir. Por tanto, se hace obligatorio realizar un estudio de la evolución temporal de ciertas magnitudes físicas, como la energía total del sistema (que, como sabemos, ha de permanecer constante) o el momento lineal y el momento angular. Así pues, haciendo uso de esta idea, podremos desechar alguno de los métodos aplicados y establecer un criterio para seleccionar qué método reproduce el problema simulado de un modo más fiel a la realidad.

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Estudio del caso de 2 masas iguales

En primer lugar, analizaremos el caso más sencillo: El de una cadena lineal de sólo 2 masas puntuales $m = 2$ con un muelle central de constante $C_1 = 2,5$ y un muelle con los extremos de constante $C_0 = 1$, a fin de poder comprobar que lo obtenido para el comportamiento de estas partículas coincide con el cálculo teórico, en el que los modos de vibración son de la forma:

$$\omega_s = \sqrt{\frac{C_0}{m}} \quad \omega_r = \sqrt{\frac{(C_0 + 2 \cdot C_1)}{m}}$$

Así pues, realizamos el cálculo numérico a través del programa `cadenavibra2masas-pjla.f`, mediante el cual calcularemos lo que ocurre hasta que transcurran $t = 150s$ con un número de instantes temporales de $N_{time} = 10000$. Para ello, consideramos unas perturbaciones iniciales respecto a la posición de equilibrio aleatorias, haciendo uso de la subrutina `ran2-r8.f` introducida en el curso previo de Física Computacional, y unas velocidades iniciales nulas. De tal modo, utilizaremos los métodos propuestos a partir de la subrutina `iterarvibra-pjla.f`.

Comenzamos con el estudio de las posiciones, de modo que se ha calculado numéricamente la evolución temporal de las posiciones y velocidades de las ambas partículas. Los resultados obtenidos se muestran en las siguientes gráficas:

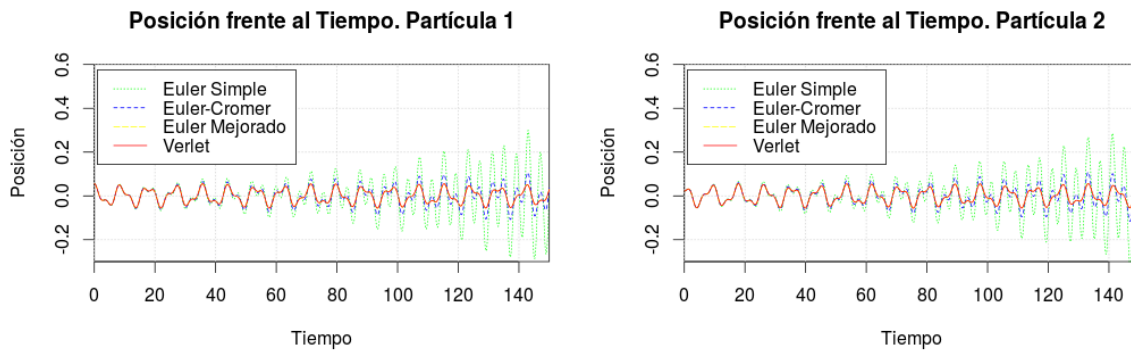


Figura 1: Caso 2 partículas: Posición de las partículas en función del tiempo.

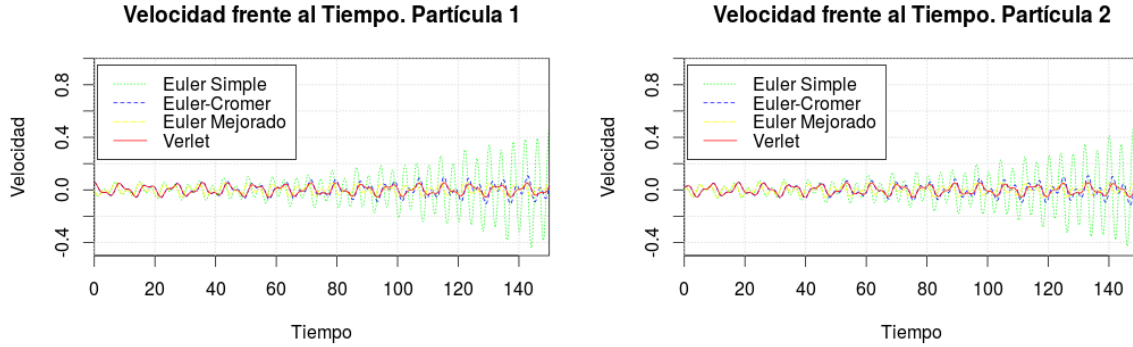


Figura 2: Caso 2 partículas: Velocidad de las partículas en función del tiempo.

Como podemos apreciar en la imagen, simplemente con la evolución temporal de la posición y la velocidad de nuestras dos partículas es posible desechar el método de Euler simple. Vemos como el resto de métodos ofrecen resultados con cierta consistencia y con oscilaciones correctas.

Como hemos comentado, es necesario que nuestra simulación sea consistente con la física del problema, de forma que la evolución temporal de ciertas magnitudes físicas deben de permanecer constante, como es el caso de la energía total del sistema, o como el espacio de fases, que debe permanecer con una órbita cerrada. Así pues, se han estudiado esta energía total y el espacio de fases para los cuatro métodos estudiados, a fin de realizar una selección del más adecuado para próximos casos a tratar.

A continuación, en las siguientes gráficas, realizadas con ayuda de RStudio, se muestra la evolución de la energía total del sistema en función del método utilizado:

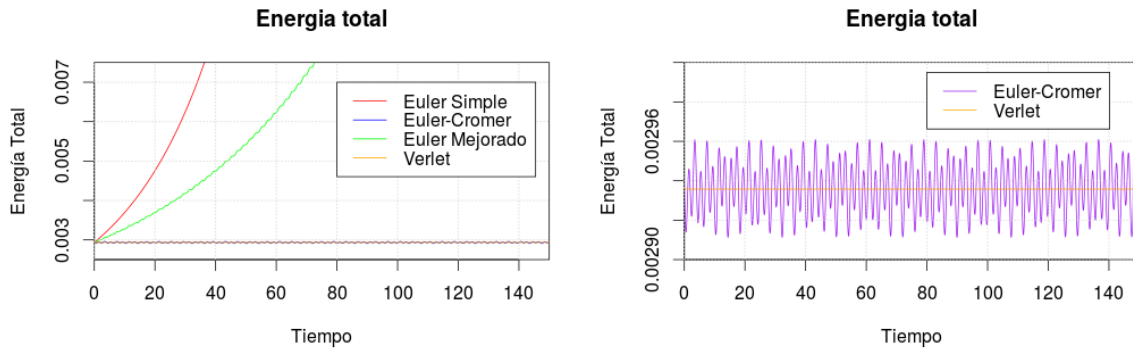


Figura 3: Caso 2 partículas: Energía del sistema en función del tiempo.

Podemos apreciar como el método de Euler simple ofrece un brutal crecimiento de la energía con el paso del tiempo, lo cual confirma nuestra idea de desecharlo. Por su parte, el método de Euler mejorado ofrece también un crecimiento excesivo. En cambio, los métodos de Euler-Cromer y de Verlet ofrecen un mejor comportamiento, tal y como podemos apreciar, de forma que en ambos casos apreciamos una energía oscilando en torno a un cierto valor.

Sin embargo, la segunda gráfica nos permite constatar que el método de Verlet ofrece una oscilación de la energía muchísimo menor que el método de Euler-Cromer. Por tanto, podemos concluir señalando que el método que mejor reproduce la física del problema en nuestra simulación numérica es el método de Verlet. Por tanto, usaremos los datos calculados con este método para futuros casos de estudio y lo que resta de este.

Si representamos el espacio de fases, podemos apreciar como efectivamente se produce el comportamiento señalado, de forma que solamente los métodos de Euler-Cromer y Verlet nos ofrecen un espacio de fases cerrado (lo cual, como sabemos, implica la conservación de la energía):

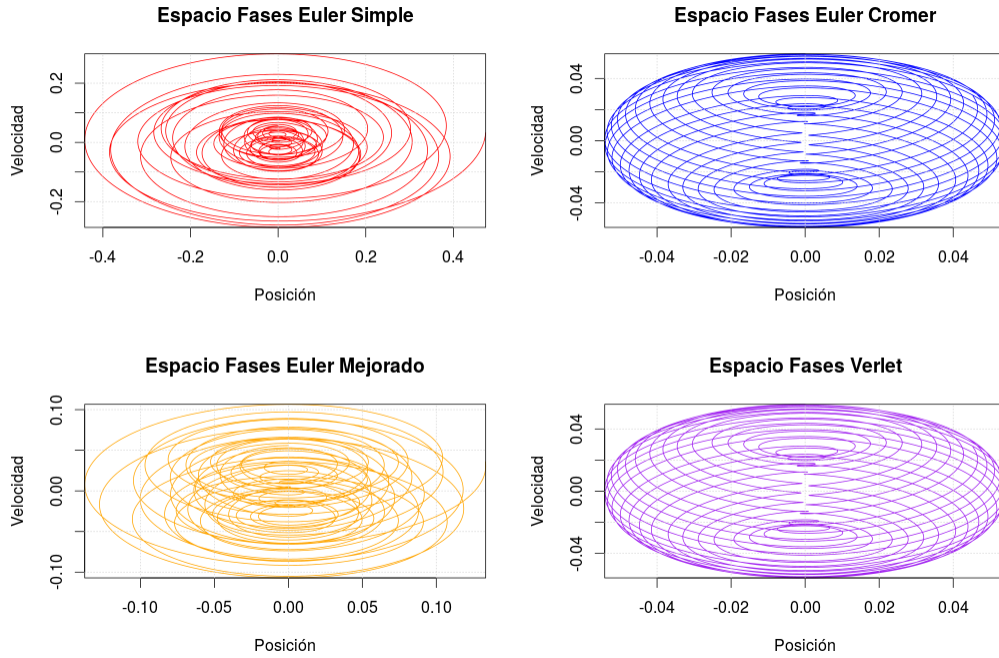


Figura 4: Caso 2 partículas: Espacio de fases para los distintos métodos utilizados.

En cuanto a la transformada de Fourier, haremos uso del programa `fouriercadenavibrat-pjla.f` para realizarla y obtener así las periodicidades. Para ello, leeremos los datos de las posiciones y/o velocidades anteriormente obtenidos con el método de Verlet y aplicaremos la transformada de Fourier para obtener el espectro de frecuencias. Para ello, utilizaremos la subrutina `dfour1.f`, introducida en el curso previo de Física Computacional. Seleccionaremos un paso de avance de igual valor al utilizado en la simulación del problema, en el que teníamos un tiempo de $t = 150s$ con un número de pasos $N_{time} = 10000$.

Los resultados obtenidos para el cálculo del espectro de frecuencias en base a los archivos de posiciones de ambas partículas se representan en las gráficas adjuntas:

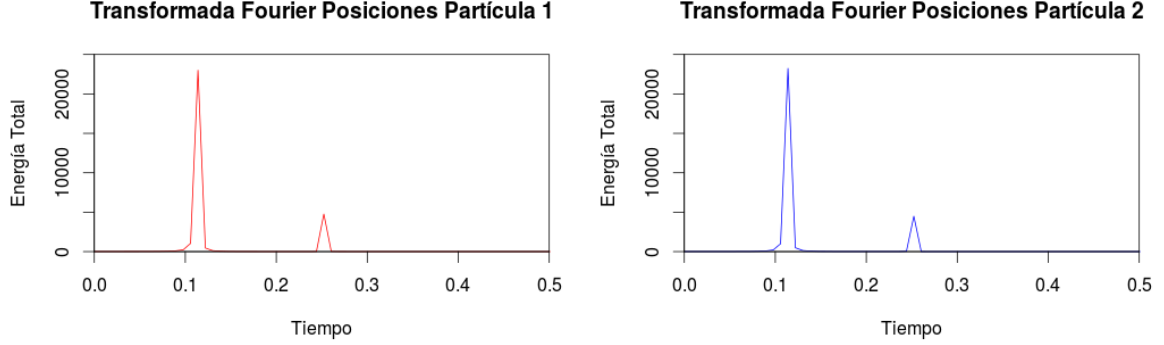


Figura 5: Caso 2 partículas: Transformada de Fourier para obtener las periodicidades en base a las posiciones de las partículas en el tiempo

Vemos como ambos cálculos dan lugar a espectros de frecuencias exactamente iguales. Como sabemos, las frecuencias propias de las partículas en nuestro problema serán aquellos valores del eje horizontal en los que aparecen nuestros picos. Puesto que las frecuencias se relacionan con las frecuencias angulares mediante la relación $\omega = 2\pi\nu$, hemos de multiplicar lo obtenido por 2π . De tal modo, como podemos apreciar en la imagen, los valores para estas frecuencias propias son:

$$\nu_1 = 0,2525Hz \quad \nu_2 = 0,1142Hz \quad \Rightarrow \quad \omega_1 = 1,5862rad/s \quad \omega_2 = 0,7173rad/s$$

Por tanto, ello coincide notablemente, de acuerdo a las constantes elegidas para nuestro problema, con los valores teóricos propuestos, que serán $\omega_{1,teo} = 0,707rad/s$ $\omega_{2,teo} = 1,581rad/s$.

2.2. Estudio del caso de varias masas con valores aleatorios

Podemos hacer un estudio más general, considerando un sistema de $N = 9$ partículas más las dos partículas de los extremos, las cuales están fijas. De tal modo, definimos masas y constantes de amortiguamiento totalmente aleatorias, haciendo uso de la subrutina `ran2-r8.f`.

Así pues, realizamos el cálculo numérico a través del programa `cadenavibratgeneral-pjla.f` y la subrutina `iterarvibra-pjla.f`, en los cuales consideraremos un total de $N_{time} = 2^{20}$ pasos temporales y con un paso de avance temporal de $h = 0,0025$. El hecho de definir un total de pasos como potencia de 2 nos permitirá utilizar todos los datos generados para estudiar las periodicidades del sistema mediante el método de la transformada de Fourier. Cabe destacar que hemos definido dicho paso temporal lo suficientemente pequeño para reproducir el movimiento de las partículas sin ocultar ningún tipo de periodicidades y dicho número total de pasos con un valor tan elevado para que nos permita realizar un barrido en frecuencias con un paso de avance muy reducido.

Para ello, de nuevo consideramos unas perturbaciones iniciales respecto a la posición de equilibrio aleatorias y unas velocidades iniciales nulas. Puesto que ya comprobamos con nuestro primer estudio que el método de Verlet es el que mejor reproduce la física del problema, sólomente realizaremos la simulación numérica para dicho caso.

A continuación, se representan gráficamente los resultados obtenidos para las posiciones de la partícula 4 y 7 y las velocidades de la partícula 2 y 9, elegidas al azar:

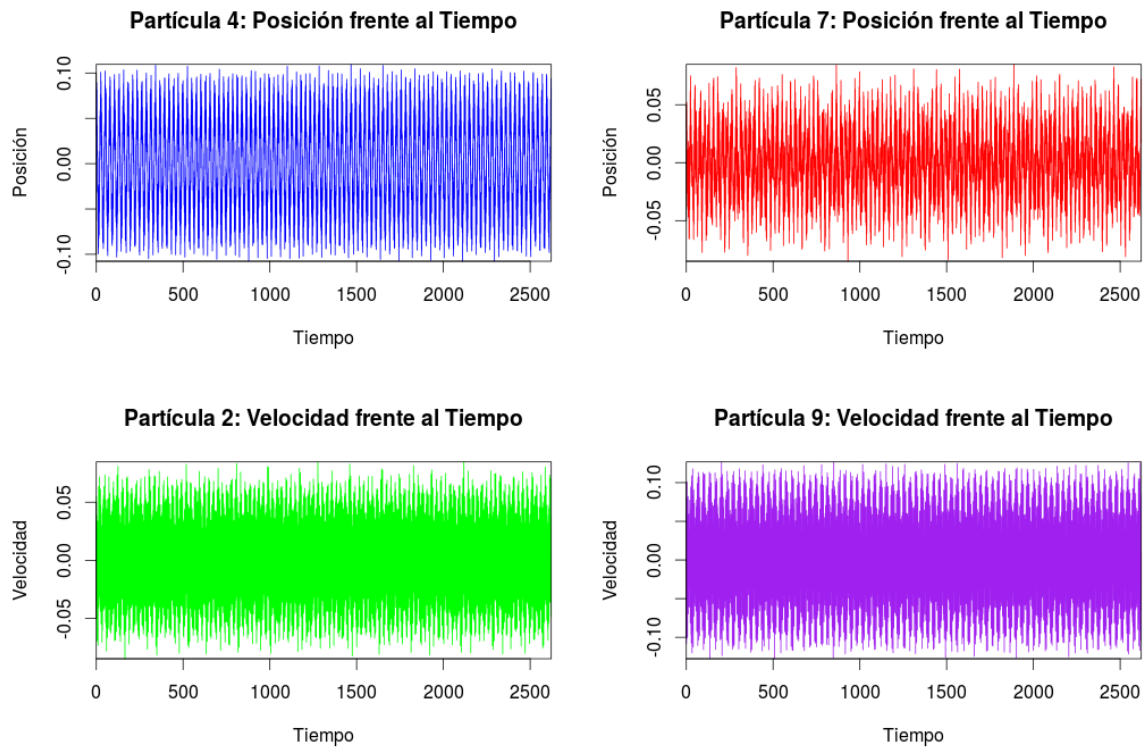


Figura 6: Representación gráfica de las evoluciones temporales de la posición de las partículas 4 y 7 y de las evoluciones temporales de la velocidad de las partículas 2 y 9.

Asímismo, también podemos comprobar como en este caso nuestra simulación continúa cumpliendo las leyes de la física. Para ello, a continuación se muestra la representación gráfica de la energía del sistema en función del tiempo:

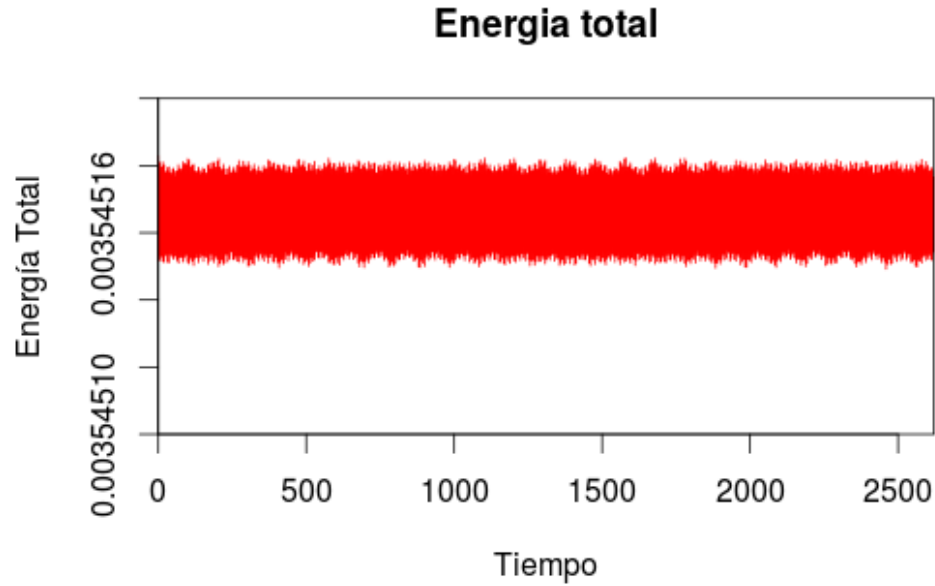


Figura 7: Caso sistema de varias partículas: Energía del sistema en función del tiempo.

Como vemos, las variaciones de la energía en este caso se hayan en la octava cifra decimal. Por tanto, podemos considerar que el método de Verlete continúa funcionando perfectamente y reproduciendo bastante bien la física del problema.

Por último, volviendo a hacer uso del programa `fouriercadenavibrat-pjla.f` para tratar de obtener todas las periodicidades del sistema. Así, puesto que contamos con $N_P = 9$ partículas con sus propios movimientos, deberíamos de ser capaces de detectar 9 modos de vibración. Para ello, habremos de recurrir a los datos de posición y velocidad en función del tiempo para las distintas partículas.

Así pues, trataremos de comprobar que el espectro de frecuencias de una partícula cualquiera recoge todas las periodicidades. De tal modo, vemos como, mediante una combinación de un plano más general del espectro con el uso del zoom, es posible encontrar todas los 9 periodicidades asociadas a los modos de vibración propios de las 9 partículas de nuestro sistema.

De tal modo, a continuación se muestra la representación del espacio de frecuencias tras haber realizado la transformada de Fourier para las posiciones de las partículas 4 y 7 y las velocidades de las partículas 2 y 9 (Todas ellas previamente representadas):

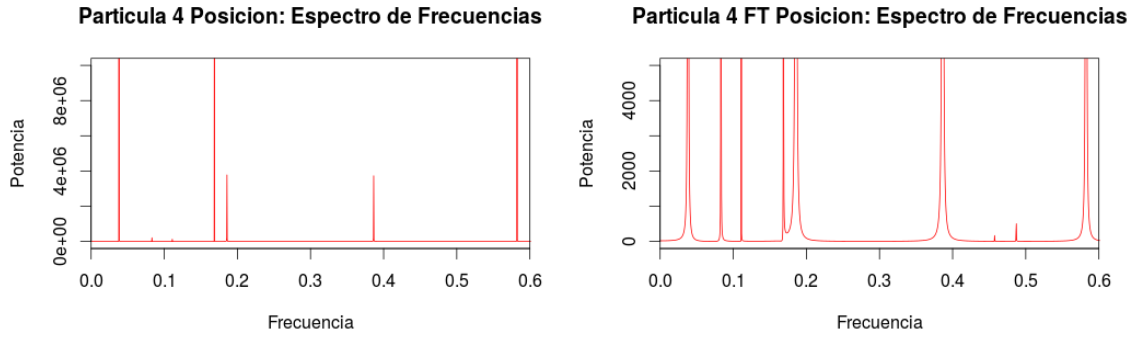


Figura 8: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la posición de la partícula 4.

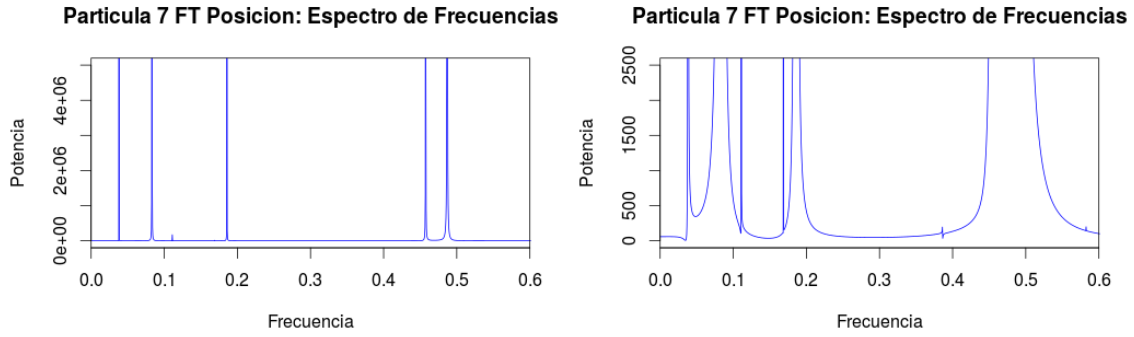


Figura 9: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la posición de la partícula 7.

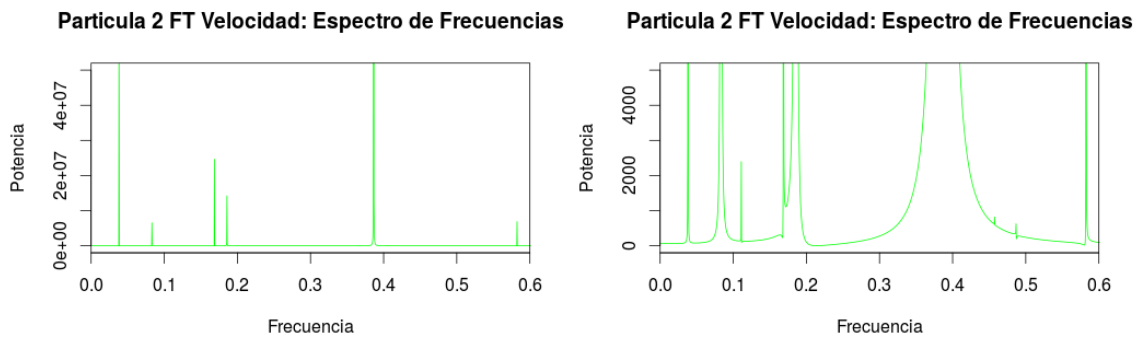


Figura 10: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la velocidad de la partícula 2.

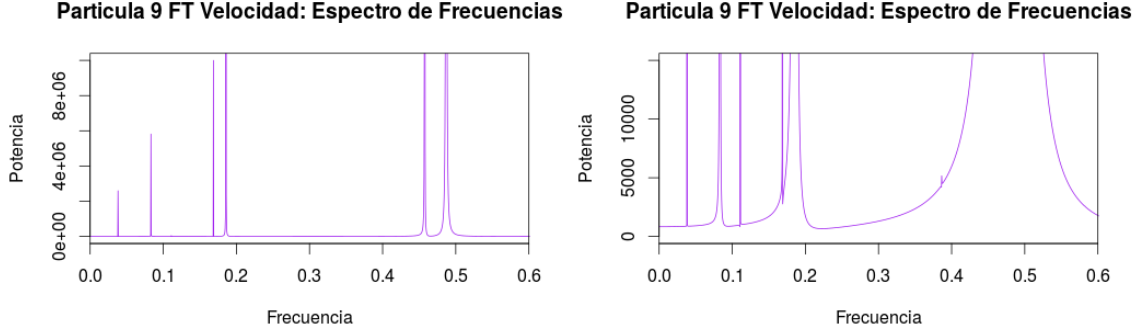


Figura 11: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la velocidad de la partícula 9.

Como podemos comprobar en todas las representaciones, los picos obtenidos en todas ellas presentan el mismo valor en el eje de frecuencias. Por tanto, estas serán las frecuencias asociadas a los modos de vibración de cada una de las partículas de nuestro sistema. Cabe destacar que en el caso de la última transformada de Fourier (La de la velocidad de la partícula 9) no se ha encontrado la última frecuencia, pero es probable que ello se deba a que al lado hay un pico de una gran amplitud y con una anchura lo suficientemente amplia como para que la frecuencia restante se sitúe dentro de él.

Por tanto, las frecuencias obtenidas han sido:

$$\begin{aligned}
 \nu_1 &= 0,0389372Hz & \nu_2 &= 0,0833860Hz & \nu_3 &= 0,1115369Hz \\
 \nu_4 &= 0,1693204Hz & \nu_5 &= 0,1856183Hz & \nu_6 &= 0,3871197Hz \\
 \nu_7 &= 0,4582379Hz & \nu_8 &= 0,4878704Hz & \nu_9 &= 0,5826946Hz
 \end{aligned}$$

2.3. Estudio del caso del enlace diatómico

Esta simulación del problema de una cadena lineal de masas puntuales puede servir para estudiar distintas configuraciones y tratar ciertos problemas de interés en Física. De tal modo, podemos utilizar lo aplicado anteriormente para estudiar un problema de gran interés en la Física del Estado Sólido como es el problema de la cadena diatómica, en la cual existe una alternancia de partículas con dos masas distintas.

Así pues, utilizaremos el algoritmo incorporado en la subrutina `iterarvibra-pjla.f` mediante el uso del programa `cadenavibratdiatom-pjla.f`, de modo que realizaremos nuestra simulación numérica para un total de $N_P = 6$ partículas, mediante un total de $N_{time} = 2^{20}$ pasos temporales y con un paso de avance temporal de $h = 0,0025$. Todo ello nos permitirá trabajar de forma análoga al problema tratado anteriormente.

Al igual que antes, haremos uso del método de Verlet, de modo que nuestra simulación debería continuar cumpliendo las leyes de la física y manteniendo una energía total constante. Así pues, a continuación se muestra la representación gráfica de la energía del sistema en función del tiempo:

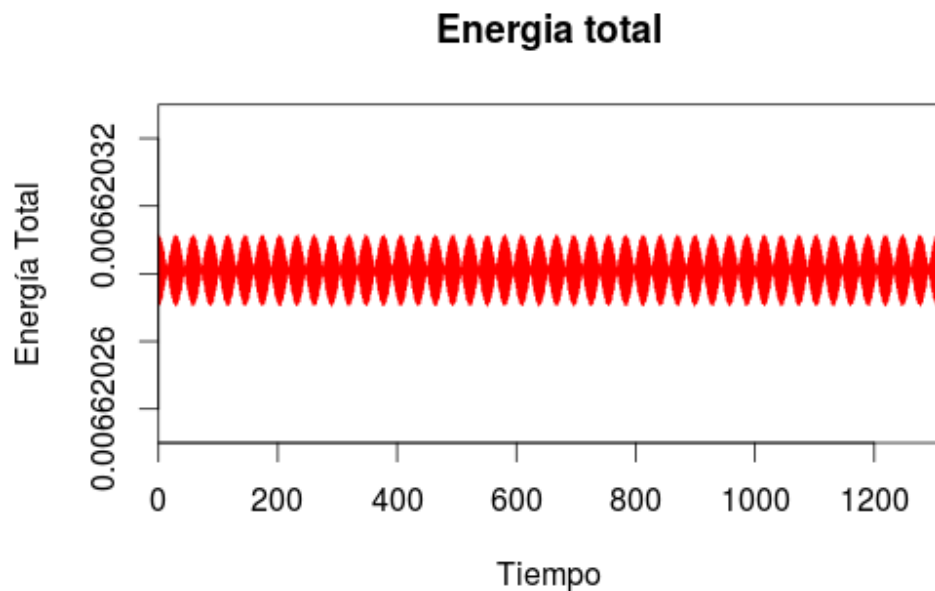


Figura 12: Caso cadena diatómica: Energía del sistema en función del tiempo.

En cuanto al movimiento de las partículas, podemos realizar algunas representaciones gráficas de la evolución temporal de la posición y de la velocidad de las partículas de nuestra cadena lineal. Así pues, se ha optado por representar la posición de la partícula 3 y la velocidad de la partícula 5, tal y como se muestra a continuación:

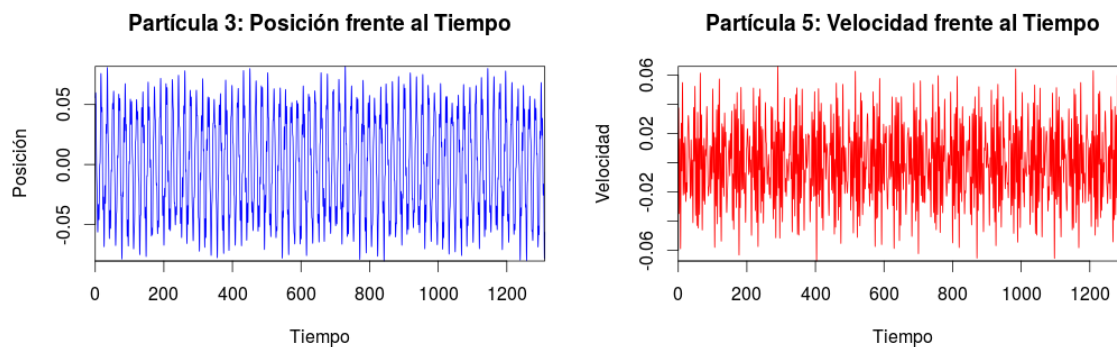


Figura 13: Caso cadena diatómica: Representación gráfica de la evolución temporal de la posición para la partícula 3 y de la evolución temporal de la velocidad para la partícula 5.

De igual modo que en los casos anteriores, a continuación procedemos a obtener los modos de vibración de nuestro sistema. Para ello, volveremos a estudiar las periodicidades de acuerdo a los datos previamente representados (es decir, posición de la partícula 3 y velocidad de la partícula 5) sobre los cuales hemos aplicado nuestro algoritmo de la transformada de Fourier de acuerdo al programa [fouriercadenavibrat-pjla.f](#).

Por tanto, a continuación se muestra la representación del espacio de frecuencias tras haber realizado la transformada de Fourier para dichas partículas:

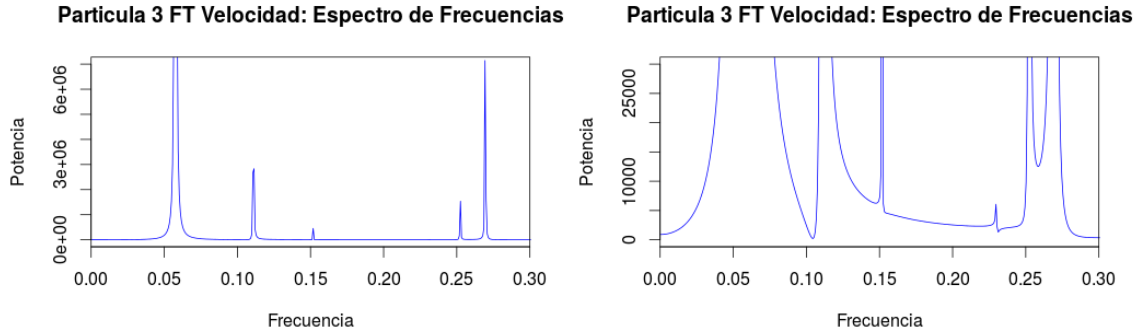


Figura 14: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la posición de la partícula 3.

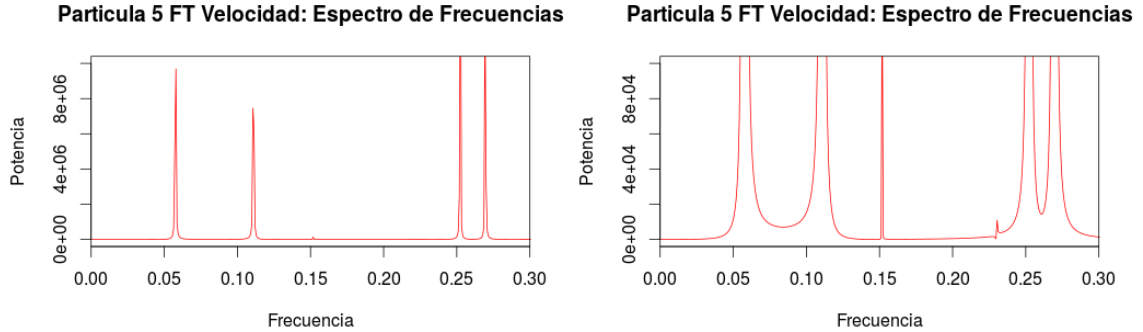


Figura 15: Representación gráfica del espacio de frecuencias obtenido para los datos de la evolución temporal de la velocidad de la partícula 5.

Como podemos comprobar en base a nuestras representaciones de la transformada de Fourier, los picos obtenidos en todas ellas presentan el mismo valor en el eje de frecuencias. Estas serán las frecuencias asociadas a los modos de vibración de cada las partículas de nuestro sistema.

Por tanto, las frecuencias obtenidas han sido:

$$\begin{aligned}\nu_1 &= 0,057Hz & \nu_2 &= 0,111Hz & \nu_3 &= 0,152Hz \\ \nu_4 &= 0,230Hz & \nu_5 &= 0,252Hz & \nu_6 &= 0,269Hz\end{aligned}$$

Como vemos, encontramos un único modo de vibración asociado a cada una de nuestras partículas.

3. Conclusiones

Así pues, en esta práctica hemos sido capaces de realizar un estudio numérico de una cadena lineal, de forma que hemos utilizado los distintos métodos numéricos que conocemos para estudiar la evolución del sistema. Así, hemos podido comprobar cuál es el método que mejor se adecua a la realidad física, para lo cual hemos analizado magnitudes físicas como la energía y el espacio de fases.

Así pues, una vez decidido el método numérico a utilizar, hemos realizado la simulación de varios sistemas y situaciones. De tal modo, nuestro algoritmo nos ha permitido obtener cuál es el movimiento de cada una de las partículas de la cadena lineal, así como los modos de vibración de cada partícula mediante el uso del análisis de Fourier.