Física Computacional

Ano lectivo 2018/2019

TPC2 - Sistemas de equações

O trabalho de casa é para ser feito no período entre as 16h de Sexta-feira (12/04/2019) e as 24:00 de Domingo (14/04/2019) com a excepção dos alunos que acordaram com o regente outro período por incompatibilidades. O trabalho é individual mas é encorajada a troca de ideias, a discussão e a procura e leitura de referências. A avaliação é de $\{0, 1, 2\}$ valores.

1. Exercício

Considere um sistema de N massas acopladas entre si e a duas paredes fixas com $N+1$ molas:

$$m_i \frac{d^2 X_i}{dt^2} = -k_i \left(X_i - X_{i-1}\right) + k_{i+1} \left(X_{i+1} - X_i\right)$$

onde $X_0 = 0$ e $X_{N+1} = L$. Podemos usar como unidades de comprimento a distância entre as paredes, com unidade de massa o valor médio das massas e como unidade de tempo

$$\tau = \sqrt{\frac{\overline{m}}{\overline{k}}}$$

onde $\overline{m}$ é a massa média do sistema e $\overline{k}$ a constante média das molas.

1. Escreva uma rotina que resolva um sistema de equações usando uma eliminação de Gauss com pivotagem parcial.

2. Considerando massas iguais e molas iguais,

   (a) Em que condições o sistema está em equilíbrio? Resolva o correspondente sistema de equações e obtenha as posições de equilíbrio (X_i^{eq}).

   (b) Verifique que no equilíbrio as distâncias entre massas são sempre iguais e iguais a $1/(N+1)$.

3. Gere aleatoriamente valores de m_i usando uma distribuição gaussiana com largura igual a um décimo do valor médio. Mudaram as distâncias entre as posições de equilíbrio?

4. Gere aleatoriamente valores de k_i usando a mesma distribuição gaussiana. Faça um histograma das diferenças entre as posições de equilíbrio de massas consecutivas para uma sistema com $N = 2^{10}$.

5. Fazendo a mudança de variável, $x_i = X_i - X_i^{eq}$ podemos transformar o sistema de equações diferenciais em,

   $$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = A_{ij} x_j \qquad \text{com } 1 \leq i \leq N$$

   onde é usada a convenção de índices repetidos e a matriz A é simétrica e tridiagonal no caso das massas serem iguais.

   (a) Note que sabendo os valores próprios do sistema de A, λ_β, e os respectivos vectores próprios v_i^β (devidamente normalizados $\sum_i v_i^\beta v_i^\alpha = \delta_{\alpha\beta}$), podemos construir um novo conjunto de variáveis,

   $$f_\beta = U_{\beta i}^T x_i$$

onde U é uma matriz ortogonal com os vectores próprios, v_i^β,em cada coluna e U^T é a sua transposta ($U_{j\alpha}U_{\alpha i} = \delta_{ji}$). Note-se ainda, que

$$\sum_{i,j} U^T_{\beta i} A_{ij} U_{j\alpha} = D_{\alpha\beta}$$

onde D é a matriz diagonal com os valores, $D_{\alpha\alpha} = \lambda_\alpha$. Fazendo a mudança de coordenadas associada a esta transformação ortogonal, obtemos o seguinte sistema equivalente

$$\frac{d^2 f_\beta}{dt^2} = D_{\beta\alpha} f_\alpha.$$

Como D é diagonal as equações desacoplam, i.e.

$$\frac{d^2 f_\beta}{dt^2} = \lambda_\beta f_\beta,$$

que admitem soluções da forma

$$f_\beta = A_\beta e^{t\sqrt{\lambda_\beta}} + B_\beta e^{-t\sqrt{\lambda_\beta}}$$

Logo a diagonalização da matriz A permite a solução do sistema de equações no tempo. Utilize a decomposição QR para obter, quer os valores próprios, quer os vectores próprios de uma matriz com k_i aleatórios como descrito anteriormente ($N = 10$).

(b) Sabendo a forma das equações próprias do sistema, a evolução temporal nas coordenadas $x_i(t)$ é dada por

$$x_i = U_{i\beta} A_\beta e^{t\sqrt{\lambda_\beta}} + U_{i\beta} B_\beta e^{-t\sqrt{\lambda_\beta}}$$

Logo para determinar a evolução temporal, apenas falta definir as contantes A_β e B_β a partir das condições iniciais. Tome como condição inicial as velocidades nulas e as posições aleatórias com $x \in]-1/(N+1), 1/(N+1)[$. Obtenha as constantes A_β e B_β.

(c) Represente no tempo a posição de cada uma das massas a partir das condições iniciais da alínea anterior.

2. Exercício

Considere o sistema de massas discutido na pergunta anterior e aplique uma força na massa l dada por,

$$F_l = Fe^{i\Omega t}$$
$$m\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -k_i\left(x_i - x_{i-1}\right) + k_{i+1}\left(x_{i+1} - x_i\right) + \delta_{il} F e^{i\Omega t - \gamma |t|}$$

Fazendo a transformada de Fourier, desta equação obtemos

$$-m\omega^2 x_i(\omega) = -k_i\left(x_i(\omega) - x_{i-1}(\omega)\right) + k_{i+1}\left(x_{i+1}(\omega) - x_i(\omega)\right) + \frac{2\gamma F}{\gamma^2 + (\omega - \Omega)^2}\delta_{il}$$

onde para cada Ω obtemos uma solução $x_i(\omega)$. Analisando, apenas para $\omega = \Omega$ e considerando $\tilde{F} = 2F/\gamma$

1. Considerando o sistema aleatório com $N = 10$ e $\tilde{F} = 1$ e $l = 0$, represente num gráfico com as ordenadas em escala logarítmica as soluções $|x_i(\Omega)|$ como função de Ω. Todas as curvas têm os mesmos máximos?

2. Identifique na alínea anterior a posição dos valores próprios do sistema livre. Discuta o resultado.

3. Escolha algumas das frequências onde existem os picos e as respectivas soluções x_i. Para cada uma das soluções escolhidas, normalize-a e transforme as suas coordenadas calculando,

$$f_\beta = U^T_{\beta i} x_i.$$

   Represente cada um dos $|f_\beta|$ que obteve. Que conclusões pode tirar?

4. Repita o procedimento anterior adicionando uma outra força para $i = 9$ mas com amplitude $\tilde{F} = -0.001$ na equação da transformada de Fourier (mantemos a força em $l = 0$). O que observa?

Boa Sorte