
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:

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

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

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

onde \bar{m} é a massa média do sistema e \bar{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 de 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,

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

onde é usada a convenção de índices repetidos e a matriz A é simétrica e tridiagonal.

- (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

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

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 m_i e 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 constantes 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 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 k dada por,

$$F_k = F e^{i\omega t}$$

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -k_i (x_i - x_{i-1}) + k_{i+1} (x_{i+1} - x_i) + \delta_{ik} F e^{i\omega t}$$

Fazendo a transformada de Fourier, desta equação obtemos

$$-m\omega^2 x(\omega) = -k_i (x_i(\omega) - x_{i-1}(\omega)) + k_{i+1} (x_{i+1}(\omega) - x_i(\omega)) + \delta_{ik} F$$

onde para cada ω obtemos uma solução.

1. Considerando o sistema aleatório com $N = 10$ e $F = 0.001$ e $k = 0$, 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,

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

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

4. Repita o procedimento anterior adicionando uma força para $k = 9$ igual a -0.001 na equação da transformada de Fourier. O que observa?

Boa Sorte