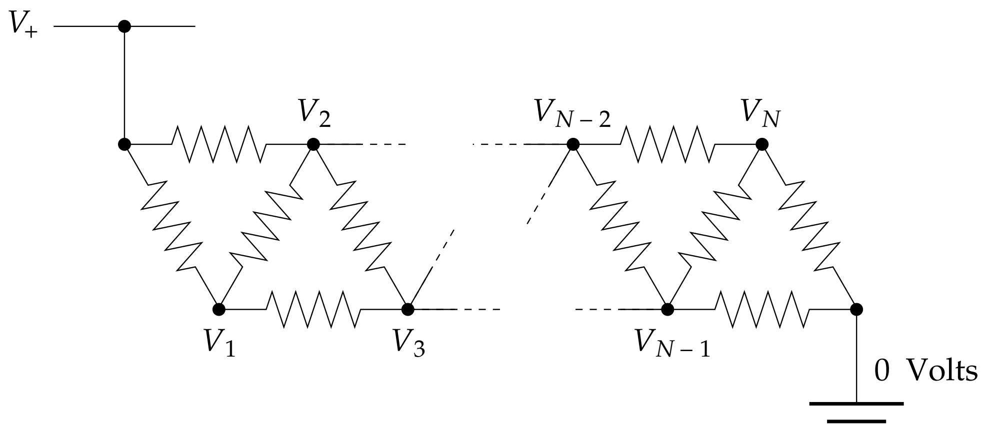
Física Computacional I

Lista de Exercícios VIII - Data para entrega: 13/11/2020

Problema 1: Começando com o programa `springsb.py` disponível no SIGAA, remova a parte do código que gera um gráfico dos resultados e coloque em seu lugar um código que cria uma animação das massas a medida que elas vibram para frente e para trás, com seus deslocamentos relativos das posições de equilíbrio sendo dadas pela parte real da equação $u_i(t) = x_i e^{i\omega t}$. Por clareza, assuma que a posição de repouso das massas estão separadas por duas unidades em um eixo horizontal. Sua animação deve ao menos mostrar cada uma das massas individuais, talvez como esferas. (Esferas de raio de cerca de 0.2 ou 0.3 funcionam bem).

Problema 2: Uma cadeia de resistores

Considere uma cadeia longa de resistores conectados conforme a figura abaixo:



Todos os resistores têm a mesma resistência R. Considerando que $V_+ = 5$V, o problema é determinar as voltagens $V_1 \ldots V_N$ nos pontos internos do circuito.

a) (Opcional) Usando a lei de Kirchhoff, que diz que a fluxo de corrente líquido em qualquer nó deve ser nulo, mostre que as voltagens $V_1 \ldots V_N$ satisfazem as equações

$$\begin{aligned}
3V_1 - V_2 - V_3 &= V_+, \\
-V_1 + 4V_2 - V_3 - V_4 &= V_+, \\
&\vdots \\
-V_{i-2} - V_{i-1} + 4V_i - V_{i+1} - V_{i+2} &= 0, \\
&\vdots \\
-V_{N-3} - V_{N-2} + 4V_{N-1} - V_N &= 0, \\
-V_{N-2} - V_{N-1} + 3V_N &= 0.
\end{aligned}$$

Expresse essas equações na forma vetorial $\mathbf{Av} = \mathbf{w}$ e encontre os valores da matriz $\mathbf{A}$ e do vetor $\mathbf{w}$.

b) Escreva um programa que determina os valores de V_i quando existem $N = 6$ junções internas com voltagens desconhecidas. (Dica: Todos os valores V_i devem estar entre zero e 5V. Se não estiverem, alguma coisa está errada.)

c) Agora repita seus cálculos para o caso quando $N = 10000$. Nessa parte não é possível usar funções como `solve` do numpy. Você deve precisar usar o fato que a matriz $\mathbf{A}$ é semelhante a uma matriz triangular mas tem muitos zeros fora da diagonal principal. Ou seja, sua matriz é da forma

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & & & & \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & & & \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & \\ & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & \\ & & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ & & & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ & & & & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix}$$

Você pode usar a função `banded` do livro do Mark Newman (disponível no SIGAA).

(Dica: Cuidado ao usar a função `banded`: a matriz A que deve ser dada possui um formato específico, que não é o de uma matriz quadrada N x N. Consulte a documentação da função, ou abrindo o banded.py ou consultando o apêndice E, que está disponível no SIGAA).

Problema 3: O algoritmo QR

Nesse exercício você irá escrever um programa para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz simétrica e real usando o algoritmo QR. O primeiro desafio é escrever um programa que calcula a decomposição QR de uma matriz. Iremos então usar essa decomposição para determinar os autovalores.

A decomposição QR expressa uma matriz quadrada real $\mathbf{A}$ na forma $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, onde $\mathbf{Q}$ é uma matriz ortogonal e $\mathbf{R}$ é uma matriz triangular superior. Dada uma matriz $\mathbf{A}$ $N \times N$, podemos calcular a decomposição QR da seguinte maneira.

Vamos imaginar a matriz como um conjunto de N vetores colunas $\mathbf{a}_0 \ldots \mathbf{a}_{N-1}$ assim:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{a}_0 & \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix},$$

onde numeramos os vetores da maneira Python, iniciando em zero, que será conveniente para quando formos escrever o programa. Definimos agora dois novos conjuntos de vetores $\mathbf{u}_0 \ldots \mathbf{u}_{N-1}$ e $\mathbf{q}_0 \ldots \mathbf{q}_{N-1}$ como segue:

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{a}_0, \qquad \mathbf{q}_0 = \frac{\mathbf{u}_0}{|\mathbf{u}_0|},$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{a}_1 - (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1)\mathbf{q}_0, \qquad \mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{u}_1}{|\mathbf{u}_1|},$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{a}_2 - (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_0 - (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_1, \qquad \mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{u}_2}{|\mathbf{u}_2|},$$

e assim sucessivamente. A fórmula geral para calcular $\mathbf{u}_i$ e $\mathbf{q}_i$ é

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{a}_i - \sum_{j=0}^{i-1} (\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{a}_i)\mathbf{q}_j, \qquad \mathbf{q}_i = \frac{\mathbf{u}_i}{|\mathbf{u}_i|}.$$

a) Mostre, por indução, que os vetores $\mathbf{q}_i$ são ortonormais, i.e., satisfazem

$$\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_j = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j, \\ 0 & \text{if } i \neq j. \end{cases}$$

(A parte acima do item (a) é opcional). Rearranjando as definições dos vetores, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_0 &= |\mathbf{u}_0|\,\mathbf{q}_0, \\ \mathbf{a}_1 &= |\mathbf{u}_1|\,\mathbf{q}_1 + (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1)\mathbf{q}_0, \\ \mathbf{a}_2 &= |\mathbf{u}_2|\,\mathbf{q}_2 + (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_0 + (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_1, \end{aligned}$$

e assim sucessivamente. Ou, podemos agrupar os vetores $\mathbf{q}_i$ como as colunas de uma matriz e escrever todas as equações como uma equação matricial simples

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{a}_0 & \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\mathbf{u}_0| & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & |\mathbf{u}_1| & \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & 0 & |\mathbf{u}_2| & \cdots \end{pmatrix}.$$

(Se parecer complicado, vale a pena fazer a multiplicação das matrizes no lado direito para verificar você mesmo que irá obter as equações corretas para os vetores $\mathbf{a}_i$.)

Observe agora que a primeira matriz no lado direito da equação acima, a matriz com colunas $\mathbf{q}_i$, é ortogonal, devido o fato que os vetores $\mathbf{q}_i$ são ortonormais. A segunda matriz é triangular superior. Em outras palavras, nós encontramos a decomposição QR: $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$. As matrizes $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}$ são

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} |\mathbf{u}_0| & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & |\mathbf{u}_1| & \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & 0 & |\mathbf{u}_2| & \cdots \end{pmatrix}.$$

b) Escreva uma função que recebe como argumento uma matriz quadrada real $\mathbf{A}$ e retorna duas matrizes $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}$ que forma a decomposição QR. Como um caso de teste, tente usar sua função na matriz

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 8 & 4 \\ 4 & 2 & 3 & 7 \\ 8 & 3 & 6 & 9 \\ 4 & 7 & 9 & 2 \end{pmatrix}.$$

Verifique o resultado multiplicando as matrizes $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}$ e obtenha a matriz original $\mathbf{A}$ novamente.

c) Usando sua função, escreva um programa completo para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz simétrica real, usando a decomposição QR. Continue o cálculo até que todos os elementos fora da diagonal da matriz tenham valores em módulo menores que 10^{-6}. Teste seu programa na matriz acima. Você deve encontrar que os autovalores são $1, 21, -3$ e -8.

(Dicas: Lembre que a função `dot` pode ser usada para calcular o produto escalar, se vetores forem usados como argumentos. Se matrizes forem usadas como argumento, a função `dot` pode ser usada para multiplicar matrizes. A função `norm` do numpy.linalg também pode ser útil.)