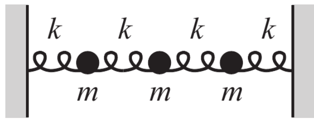
AULAS 13 E 14: FIS271 - Física Computacional I



Um exemplo tradicional na Física para o entendimento de aplicação dos auto-valores e auto-vetores é a determinação dos **modos normais de vibração** de um conjunto de N osciladores de massa m acoplados por molas (com constante elástica k) e presos nas extremidades, tal como mostra a Figura ao lado.
Por exemplo, para $N = 3$ osciladores que se localizam sobre uma linha (eixo x), existem 3 graus de liberdade (*e.g.* os deslocamentos $x_1(t)$, $x_2(t)$ e $x_3(t)$ em relação à posição de equilíbrio de cada um dos osciladores), assim teremos 3 modos normais de vibração para esse sistema. Cada modo normal é caracterizado por um auto-valor λ_n (o qual está associado às frequências de oscilação $\omega_n = \sqrt{\lambda_n}$) e um auto-vetor $\vec{u}_n$, todos determinados pelo problema definido pela relação:

$$\mathbf{H}\vec{u}_n = \lambda_n \vec{u}_n$$

onde $\mathbf{H}$ é denominada **matriz Hessiana**, que é uma matriz simétrica $N \times N$ cujos elementos são reais. A partir dos auto-valores λ_n e dos auto-vetores $\vec{u}_n = (u_n^1, u_n^2, u_n^3)$, a solução mais geral do sistema, isto é, o vetor de funções $\vec{x}(t)$ que descreve os deslocamentos das massas em função do tempo, pode ser escrito como:

$$\vec{x}(t) = \sum_{n=1}^{N} c_n \vec{u}_n \cos(\omega_n t + \phi_n) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{n=1}^{N} c_n u_n^1 \cos(\omega_n t + \phi_n) \\ \sum_{n=1}^{N} c_n u_n^2 \cos(\omega_n t + \phi_n) \\ \sum_{n=1}^{N} c_n u_n^3 \cos(\omega_n t + \phi_n) \end{pmatrix} \quad , \tag{1}$$

onde as constantes c_1, c_2, c_3, ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 são determinadas pelas condições iniciais, isto é, pelos deslocamentos $x_1(0)$, $x_2(0)$ e $x_3(0)$ e velocidades $v_1(0)$, $v_2(0)$ e $v_3(0)$ iniciais.

Exercício 1. Para o caso de $N = 3$ osciladores é possível mostrar que as equações de movimento de Newton (veja págs. 9 e 10 da ref. [1]) podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned} m\frac{d^2x_1(t)}{dt^2} &= -kx_1 - k(x_1 - x_2) \quad , \\ m\frac{d^2x_2(t)}{dt^2} &= -k(x_2 - x_1) - k(x_2 - x_3) \quad , \\ m\frac{d^2x_3(t)}{dt^2} &= -k(x_3 - x_2) - kx_3 \quad . \end{aligned}$$

Considerando a solução dada pela Eq. 1, é possível mostrar que o auto-valor λ_n do n-ésimo modo de vibração e o seu auto-vetor correspondente $\vec{u}_n$ podem ser determinados através da solução do seguinte problema:

$$(\mathbf{H} - \lambda_n \mathbb{1})\vec{u}_n = 0 \tag{2}$$

onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade e

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2\omega_0^2 & -\omega_0^2 & 0 \\ -\omega_0^2 & 2\omega_0^2 & -\omega_0^2 \\ 0 & -\omega_0^2 & 2\omega_0^2 \end{pmatrix} \quad ,$$

sendo $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.

a) Considerando que o problema de encontrar auto-valores restringe-se à determinar os valores de λ_n $(n = 1, 2, 3)$ que satisfazem a relação $\det(\mathbf{H} - \lambda_n \mathbb{1}) = 0$ (pág. 352 de [2]), mostre que as frequências de oscilação dos modos normais são dadas por [1]:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \sqrt{\lambda_1} = \omega_0 \sqrt{(2 - \sqrt{2})} \quad , \\ \omega_2 &= \sqrt{\lambda_2} = \omega_0 \sqrt{2} \quad , \\ \omega_3 &= \sqrt{\lambda_3} = \omega_0 \sqrt{(2 + \sqrt{2})} \quad . \end{aligned}$$

b) Utilize o método de Newton-Raphson (vide Roteiro das Aulas 9 e 10) para encontrar as 3 raízes positivas do polinômio característico $p(\lambda) = \det(\mathbf{H} - \lambda_n \mathbb{1})$ assumindo $\omega_0 = 0,4\,\mathrm{rad.s^{-1}}$. Compare seus resultados com os valores obtidos no item (a).

c) Os auto-vetores $\vec{u}_n$ correspondentes aos auto-valores encontrados nos items anteriores podem ser obtidos analiticamente através da Eq. 2 e, de acordo com [1], são:

$$\vec{u}_1 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{u}_2 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \vec{u}_3 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{3}$$

Implemente o **método da potência** (eq. 2.81/pág. 41 de [3]) para encontrar as componentes do auto-vetor relativo ao maior auto-valor considerando um vetor inicial $\vec{u}_0$ da sua escolha. Compare com os valores esperados acima.

d) A princípio, os outros auto-vetores $\vec{u}_n$ poderiam ser calculados numericamente utilizando o método de decomposição LU (vide Roteiro das Aulas 11 e 12) considerando, por exemplo, o sistema linear $\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{b}$ onde

$$\mathbf{A}(\lambda_n) = (\mathbf{H}-\lambda_n\mathbb{1}) = \begin{pmatrix} 2\omega_0^2-\omega_n^2 & -\omega_0^2 & 0 \\ -\omega_0^2 & 2\omega_0^2-\omega_n^2 & -\omega_0^2 \\ 0 & -\omega_0^2 & 2\omega_0^2-\omega_n^2 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{u}=\vec{u}_n = \begin{pmatrix} u_n^1 \\ u_n^2 \\ u_n^3 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Contudo, como a matriz $\mathbf{A}$ é singular, o sistema linear deve ser resolvido **iterativamente**, por exemplo, utilizando **o método de relaxação de Jacobi** (vide pág. 32 de [3]) ou **o método da potência inverso** (vide pág. 460 de [2]). Crie um programa que implemente algum desses dois métodos e mostre que, para os auto-valores obtidos no item (b), os auto-vetores serão proporcionais às entradas definidas pelas expressões da equação (3). Considere "chutes iniciais" $\vec{u}_n^{(0)}$ da sua escolha e assuma como critério de parada erros relativos $\varepsilon^{i,(k)} = |u_n^{i,(k)} - u_n^{i,(k-1)}|/|u_n^{i,(k)}|$ menores que 0.01 para todas as entradas $i=1,2,3$ do n-ésimo auto-vetor.

Referências:

[1] `http://www.people.fas.harvard.edu/~djmorin/waves/normalmodes.pdf`
[2] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3rd ed.)
[3] F. J. Vesely. Computational Physics: An Introduction (2nd ed., 2001).