SME0305 - 2016

Gustavo C. Buscaglia / Roberto F. Ausas

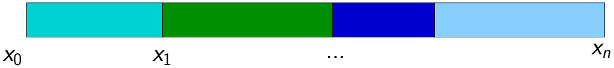
ICMC - Ramal 738176, gustavo.buscaglia@gmail.com
ICMC - Ramal 736628, rfausas@gmail.com

Formas quadráticas e matrizes simétricas definidas positivas

- As matrizes simétricas e definidas ou semi-definidas positivas são frequentes na física e na engenharia, especialmente mecânica e civil, **porquê**?

Barras e molas

Consideremos a configuração da figura:



Nela, vemos barras (ou molas) conectadas em série de diferentes materiais e comprimentos relaxados:

$$k_1, \ell_1, \qquad k_2, \ell_2, \qquad \ldots \qquad k_n, \ell_n$$

A tensão e a energia elástica da barra i em deformação uniaxial, equivalentes às de uma mola, são

$$T_i = k_i \left(x_i - x_{i-1} - \ell_i\right) \,, \qquad e_i = \frac{1}{2} k_i \left(x_i - x_{i-1} - \ell_i\right)^2$$

A energia do sistema total é

$$E = \frac{k_1}{2}(x_1 - x_0 - \ell_1)^2 + \ldots + \frac{k_n}{2}(x_n - x_{n-1} - \ell_n)^2$$

Sem forças aplicadas, o sistema minimiza sua energia nas posições relaxadas seguintes dos nós:

$$X_0 = 0\ ,\ X_1 = X_0 + \ell_1,\ X_2 = X_1 + \ell_2, \ldots, X_n = X_{n-1} + \ell_n\ .$$

Com os nós nessas posições todas as tensões são zero. **Imaginemos agora que fixamos o nó 0 e deslocamos o nó n à posição $x_n = a$. Quais serão as posições de mínima energia dos nós 1 a $n-1$?**

Se acostuma trocar variável a **deslocamentos**

$$u_0 = x_0 \ , \ u_1 = x_1 - X_1 \ , \dots \ , u_n = x_n - X_n \ ,$$

Notar que

$$e_i = \frac{k_i}{2}(x_i - x_{i-1} - \ell_i)^2 = \frac{k_i}{2}(X_i + u_i - X_{i-1} - u_{i-1} - \ell_i)^2 = \frac{k_i}{2}(u_i - u_{i-1})^2$$

$$T_i = k_i(x_i - x_{i-1} - \ell_i) = k_i\,(u_i - u_{i-1})$$

$$E(u_0, \dots, u_n) = \sum_{i=1}^{n} \frac{k_i}{2}(u_i - u_{i-1})^2$$

A energia é uma **forma quadrática** em u_0, ..., u_n.

Def. 1: Uma forma quadrática em $\mathbb{R}^n$ é um polinômio homogêneo de grau 2 em m variáveis.

Teorema 1: Para toda forma quadrática E nas variáveis $u = (u_0, \ldots, u_n)^T$ existe uma única matriz simétrica K tal que

$$E(u) = \frac{1}{2}\, u^T\, K\, u\, .$$

A forma E tem um mínimo único se e só se a matriz K é definida positiva.

Exercício 1: Calcular a matriz K, explicando.

Hint: Escreva in extensum a equação acima e iguale os coeficientes.

$$u^T\, K\, u\; = \sum_{i,j=0}^{n} K_{ij} u_i u_j = K_{00} u_0^2 + 2K_{01} u_0 u_1 + 2K_{02} u_0 u_2 + \ldots$$

$$E(u) = \frac{k_1}{2} u_0^2 - k_1\, u_0\, u_1 + \frac{k_1 + k_2}{2} u_1^2 - k_2 u_1 u_2 + \ldots$$

Acaba sendo

$$K = \begin{pmatrix} k_1 & -k_1 & 0 & \dots & 0 \\ -k_1 & k_1 + k_2 & -k_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & -k_n & k_n \end{pmatrix}$$

$$K_{ij} = \begin{cases} k_1 & \text{se } i = j = 0 \\ k_n & \text{se } i = j = n \\ -k_i & \text{se } j = i - 1 \\ -k_{i+1} & \text{se } j = i + 1 \\ k_i + k_{i+1} & \text{se } 1 \leq i = j \leq n - 1 \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

Exercício 2: Programar K em Octave.

Nos aparece o seguinte problema:

Determinar o mínimo u da energia

$$E(v) = \frac{1}{2}\, v^T K\, v$$

sobre os $v \in \mathbb{R}^{n+1}$ que satisfazem

$$v_0 = 0\ , \qquad v_n = a - X_n\ .$$

Minimizar com restrições?! Que vontade de complicar! Concordo. Minimizemos apenas sobre $u_1, \ldots, u_{n-1}$.

Seja $\tilde{K}$ a matriz restrita:

```
Ktil[1:n-1,1:n-1]=K[2:n,2:n];
```

eliminando as linhas e colunas 0 e n (notar que em Octave devemos numerar de 1 a $n+1$).
De fato, já sabemos que $u_0 = 0$ e $u_n = a - X_n$.
Agora reescrevemos, com $\tilde{v} = (v_1, \dots, v_{n-1})$,

$$\tilde{E}(\tilde{v}) = \frac{1}{2}\ \tilde{v}^T\ \tilde{K}\ \tilde{v}\ -\ k_n v_{n-1}(a - X_n)\ +\ \frac{k_n}{2}(a - X_n)^2$$

Essa é a energia **restrita** ao subconjunto que satisfaz as condições de borda impostas.

Determinar o mínimo $u = (0, \tilde{u}, a - X_n)$ da energia

$$\tilde{E}(\tilde{v}) = \frac{1}{2}\, \tilde{v}^T\, \tilde{K}\, \tilde{v} \ - \ \tilde{v}^T\, b$$

onde $b \in \mathbb{R}^{n-1}$ é definido por

$$b = (0, 0, \ldots, 0, k_n(a - X_n))^T \ .$$

A minimização é agora sobre todo $\mathbb{R}^{n-1}$! $\Rightarrow$ Podemos utilizar as condições de mínimo:

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \tilde{v}_i} = 0 \ \forall \ i = 1, \ldots, n-1 \ .$$

Notar que desconsideramos o termo $(1/2)k_n(a - X_n)^2$ porque ele não depende das variáveis.
Exo. opcional: Alguém consegue provar que $\tilde{v}^T \tilde{K} \tilde{v} > 0$, $\forall \tilde{v} \in \mathbb{R}^{n-1}$? Nem sequer fixando $n = 4$? A diferença de K, a matriz $\tilde{K}$ não é singular.

Teorema 2: Seja A uma matriz simétrica definida positiva $m \times m$ e seja $b \in \mathbb{R}^m$. Então o único x^* que minimiza

$$F(x) = \frac{1}{2} x^T A x \; - \; x^T b$$

é a solução do sistema linear

$$A\,x \;=\; b\,.$$

No nosso caso, achamos $\tilde{u}$ resolvendo

$$\tilde{K}\,\tilde{u} \;=\; b\;.$$

A equação número i é

$$-k_i\,u_{i-1} \;+\; (k_i + k_{i+1})\,u_i \;-\; k_{i+1}\,u_{i+1} \;=\; 0\;.$$

Exercício 3: Provar que essas equações expressam o equilíbrio de forças no nó i, valendo para $1 \leq i \leq n-1$. O equilíbrio requer que $T_i = T_{i+1}$.

As posições de equilíbrio de forças são as únicas que minimizam a energia.

Exercício 4: Programar a resolução do problema original em Octave. Comparar com o código embaixo.

```
# Dados: a, X(1:n,1), k(1:n,1)
BuildK(k); #### do Exercicio 2
Ktil=K[2:n,2:n];
b=zeros(n-1,1);b(n-1)=k(n)*(a-X(n));
util=Ktil\b;
u=[util;a-X(n)];
x=X+u;
T(1,1)=k(1)*u(1);
T(2:n,1)=k.*(u(2:n,1)-u(1:n-1),1);
```

- Os `T` são todos iguais? Porquê?
- Quando `k` é constante se cumpre `x(i)=a*i/n`? Porquê?
- A energia da solução é `E=-0.5*util'*b`? Porquê?

Exercício 5: Provar que, se

$$F(x) = \frac{1}{2}x^T A x - x^T b \qquad \leftrightarrow \qquad \texttt{F=0.5*x'*A*x-x'*b}$$

então o vetor coluna ∇F (`GradF`) é

$$\nabla F(x) = Ax - b \qquad \leftrightarrow \qquad \texttt{GradF=A*x-b}$$

Isto prova o Teorema 2?

Mensagens:

- A mecânica das estruturas leva muitas vezes a problemas da forma $K u = b$, onde K é uma **matriz de rigidez**, u o vetor de **deslocamentos** e b o **vetor de cargas**.

- Essas equações surgem de minimizar a energia $E = (1/2)u^T Ku - u^T b$ ou, equivalentemente, do equilíbrio de forças.

- Sabemos que K é definida positiva porque sabemos que a energia se *minimiza*. Casos com K não positiva indicam instabilidades estruturais (e.g., mecanismos, flambagem).

- É normal que a matriz K tenha milhares de linhas e colunas. Pode chegar a bilhões.

- É frequente que apenas algumas dúzias de elementos de cada linha/coluna sejam não zero (esparsidade).

- Os problemas mais frequentes na prática profissional de um engenheiro civil podem ser resolvidos por eliminação de Gauss (\ ), se se aproveita a esparsidade (Octave sabe!).

- Caso contrário se usam métodos iterativos, mas Jacobi e Gauss-Seidel não, são muito lentos para tantas incógnitas.

- É notável que problemas matematicamente **iguais** aparecem toda hora. Nosso velho amigo o problema de determinar as pressões de uma rede hidráulica é **idêntico** (apenas substituir u_i por P_i e as constantes k pelas conductâncias dos canos. É só conferir nos slides de aulas passadas.

- **Condução de calor também é igual**. Apenas substituir deslocamentos por temperaturas e k por conductividade térmica.

- **Muitos problemas probabilísticos**, incluido "option pricing", também levam a $Ax = b$ com A definida positiva e milhões de incógnitas.