

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**O Modelo de Timoshenko em Nanotubos de
Carbono Duplos e o Efeito de van der Waals**

por

Celso Menoti da Silva

Dissertação de mestrado

Prof. Dr. Julio César Ruiz Claeysen
Orientador

Porto Alegre, agosto de 2009

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Celso Menoti da Silva

O Modelo de Timoshenko em Nanotubos de Carbono Duplos e o Efeito de van der Waals / Celso Menoti da Silva.—
Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2009.

?? p.: il.

Dissertação de Mestrado—Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Matemática, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2009.
Orientador: Prof. Dr. Julio Cesar Ruiz Claeysen

Área: Vibrações, Controle e Sinais

Palavras chave: Nanotubos de carbono, Modelo de Timoshenko, Efeito van der Waals, Autovalores e Modos, Base Fundamental, Serie Chebyshev

O Modelo de Timoshenko em Nanotubos de Carbono Duplos e o Efeito de van der Waals

por

Celso Menoti da Silva

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Área de Concentração: Vibrações, Controle e Sinais

Orientador: Prof. Dr. Julio Cesar Ruiz Claeysen

Aprovada por:

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli - PPGMAp/UFRGS

Prof. Dr.^a Liara Aparecida Leal- PUCRS

Prof.Dr.^a Rosemaira Coppeti - UFSM

Prof. Dr. Waldir Roque

Coordenador do PPGMAp

Porto Alegre, 16 de junho de 2009

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pelo dom da vida e por sua misericórdia para com toda a humanidade.

Agradeço ao Professor Júlio Claeysen pela confiança, ensinamentos, incentivo, dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho e acesso a seus trabalhos de pesquisa.

Agradeço aos meus pais, pelo carinho, apoio e confiança depositados. Também aos meus irmãos, pelo companheirismo e incentivo.

Agradeço a todos os meus amigos e colegas que sempre estiveram ao meu lado, prestando apoio e fazendo críticas sempre que necessário.

Agradeço ao PPGMAp e ao CAPES, pela oportunidade e disponibilização dos recursos materiais, humanos e financeiros, sem dúvida imprescindíveis.

Sumário

RESUMO	iv
ABSTRACT	v
LISTA DE FIGURAS	vi
1 INTRODUÇÃO	1
2 O MODELO DE TIMOSHENKO EM NANOTUBOS DE CARBONO	6
2.1 Derivação do Modelo de Timoshenko	6
2.1.1 Formulação Newtoniana	7
2.1.2 Formulação Hamiltoniana	9
2.2 Formulação do Problema	13
2.2.1 Formulação matricial	15
3 MODOS	19
3.1 Base Fundamental	22
3.1.1 Fórmula analítica para $h(x)$	23
3.2 O Caso Bi-Apoiado	26
3.2.1 Freqüências obtidas pelo método espectral	27
4 POLINÔMIOS DE CHEBYSHEV	30

4.1	Definições e Propriedades	30
4.1.1	Polinômios de Chebyshev de segunda espécie	38
4.2	Série de Fourier-Chebyshev	42
4.2.1	Derivada da Série de Chebyshev	44
4.2.2	Truncamento da Série de Chebyshev	47
5	MÉTODOS PARA A RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE VALOR DE CONTORNO EM SÉRIES DE CHEBYSHEV	52
5.1	O Método de Clenshaw	52
5.2	O Método de Urabe	59
5.2.1	A solução $d(x)$ através do método de Urabe	68
6	CONCLUSÕES	72
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

RESUMO

Este trabalho faz um estudo das vibrações em um nanotubo de carbono com paredes duplas, sob a influência de forças intermoleculares. É considerado o modelo estrutural da viga de Timoshenko sujeito ao efeito de van der Waals. As amplitudes na análise modal são determinadas através da resolução de um problema de autovalor com uma equação diferencial linear de segunda ordem com coeficientes matriciais de quarta ordem que dependem não-linearmente do autovalor. A formulação matricial utiliza a base gerada pela função de Green matricial de valor inicial. Esta função depende da resolução de um problema de valor inicial com uma equação diferencial escalar de oitava ordem. São apresentados os métodos de Clenshaw e Urabe para a resolução aproximada com o uso de expansão em série com os polinômios de Chebyshev.

ABSTRACT

This work makes a study of the vibrations in a double-walled carbon nanotube, under the influence of intermolecular forces. It is considered the structural model of the Timoshenko beam of subject to the effect of van der Waals. The amplitudes in modal analysis are determined by solving an eigenvalue problem with a second-order linear differential equation whose matrix coefficients re of fourth-order and depend non-linearly upon the eigenvalue. The matrix formulation employs a basis generated by the initial value Green matrix function. This function depends on resolution of an initial value problem with an eight-order scalar differential equations. The methods of of Clenshaw and Urabe are presented for the approximate solving with the use of series expansions with the polynomials of Chebyshev.

Lista de Figuras

Figura 1.1	Estrutura do Fulereo	1
Figura 1.2	Estrutura do Nanotubo	2
Figura 1.3	Rolamento, ângulo quiral	3
Figura 1.4	Modelos: molecular, numérico e contínuo[33]	3
Figura 2.1	seção de uma viga	7
Figura 2.2	Nanotubo de carbono de parede dupla	14
Figura 4.1	Polinômios $T_5(x)$ e $U_5(x)$	39

1 INTRODUÇÃO

A nanotecnologia envolve o desenho, construção e utilização de estruturas em que ao menos uma dimensão característica é medida em nanômetros. Tem sido impulsionada pela pesquisa e desenvolvimento com nanopartículas, nanotubos de carbono e os nano-dispositivos.

Os nanotubos de carbono com múltiplas camadas, foram apresentados em 1991 [31], como produto colateral na obtenção experimental dos fulerenos obtidos em 1985. O fulereno é uma estrutura fechada de carbono com formato de bola de futebol (domo geodésico) composto por 12 pentágonos e 20 hexágonos, cuja fórmula é C_{60} .

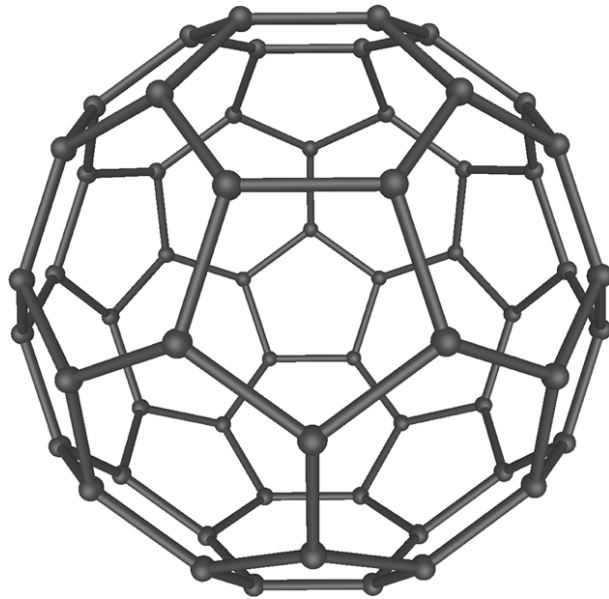


Figura 1.1 Estrutura do Fulereno

Os nanotubos de carbono são macromoléculas cilíndricas compostas de átomos de carbono em um arranjo hexagonal periódico com hibridização sp^2 , semelhantes ao grafite [30]. Eles são constituídos como se fossem folhas de grafeno enroladas, podendo até mesmo ser um único átomo de carbono de espessura.

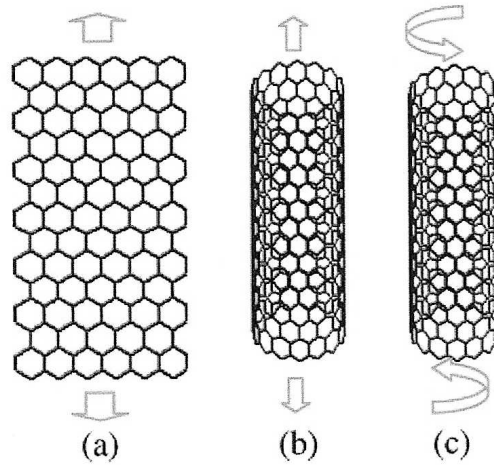


Figura 1.2 Estrutura do Nanotubo

Os nanotubos de carbono recebem esta denominação devido a sua morfologia tubular em dimensões nanométricas ($1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$), podem ser constituídos de apenas uma única camada cilíndrica de grafite (*SWNTs*, *single-walled nanotubes*) ou de múltiplas camadas concêntricas espaçadas de $0.34 - 0.36\text{nm}$ um do outro (*MWNTs*, *multiple-walled nanotubes*). Tipicamente, os nanotubos são aproximadamente 2-15 nm no diâmetro e aproximadamente 100-200 nm de comprimento. Devido ao fator da escala, exibem propriedades físicas, químicas e biológicas bastante vantajosas pela sua inserção entre a escala atômica e a escala macroscópica.

Conforme [30], existem várias possibilidades de direção para o grafite enrolar gerando um nanotubo. A força motriz para a formação de nanoestruturas fechadas de carbono tem sido atribuída à instabilidade do grafite. Desta forma os nanotubos são definidos por um vetor e um ângulo quiral que segundo [30] são dados por:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1.1)$$

$$\theta = \arcsin \left(\frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}} \right), \quad (1.2)$$

onde a_1 e a_2 formam uma base de vetores unitários e n e m são números inteiros.

O ângulo quirial \vec{C}_n é o ângulo na direção zigzag. Para cada par (n, m) temos uma maneira diferente da camada enrolar. A variação do índice de quiralidade resulta em diferentes nanotubos, mas não são encontrados nenhum tipo de tubo em particular [30]. Em tubos de paredes múltiplas, cada cilindro possui uma natureza distintas. Existem dois tipos de configurações altamente simétricas: as denominadas tubos tipo poltrona (*armchair*) e tubos zigzague (*zigzag*).

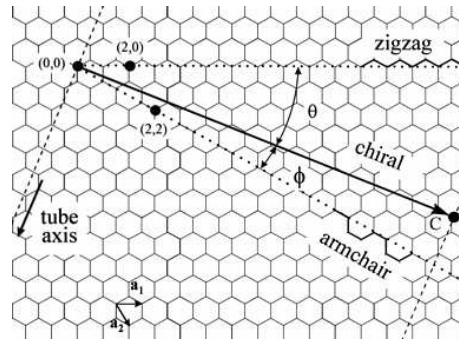


Figura 1.3 Rolamento, ângulo quirial

Devido a grande razão de aspecto, os nanotubos de carbono exibem um módulo de Young, E , de 1,2TPa e suportam tensões centenas de vezes mais elevadas de aquelas aplicadas ao ferro. Os nanotubos são termicamente estáveis até $2800^{\circ}C$ (no vácuo) e exibem uma condutibilidade térmica aproximadamente duas vezes mais alta que a do diamante [49], e podem exibir uma capacidade de conduzir corrente elétrica muito superior a apresentada pelos fios do cobre. [17]

Com o uso de variados caminhos experimentais, teóricos e computacionais, extensivos estudos de pesquisa sobre as propriedades dos nanotubos de carbono foram realizadas. Visto que as experiências controladas na escala nano são difíceis devido ao amplo espalhamento (*wide scatter*) nos valores experimentais relatados, e as simulações moleculares da dinâmica permanecem pesadas para os sistemas em grande escala ($10^6 - 10^8$ átomos por alguns nanossegundos). Os modelos elásticos contínuos têm sido extensamente usados com sucesso para estudar o

comportamento mecânico de CNT's, tal como a deflexão de estática, a vibração térmica e frequências ressonantes.

A importância de estudar vibrações em CNTs está em suas propriedades mecânicas e eletrônicas aplicadas em um número de dispositivos nanomecânicos tais como osciladores, detectores da carga, pulsos de disparo, dispositivos de campo e sensores de emissão. As vibrações de CNTs ocorrem durante determinados processos de manufatura (por exemplo, ultrassonificação em processamento de nanocompósitos) e como parte de alguns processos de avaliação nanodestrutiva como a espectroscopia de Raman. É assim importante ter modelos teóricos exatos para as frequências naturais e a formas dos modos dos nanotubos de carbono por diversas razões [24].

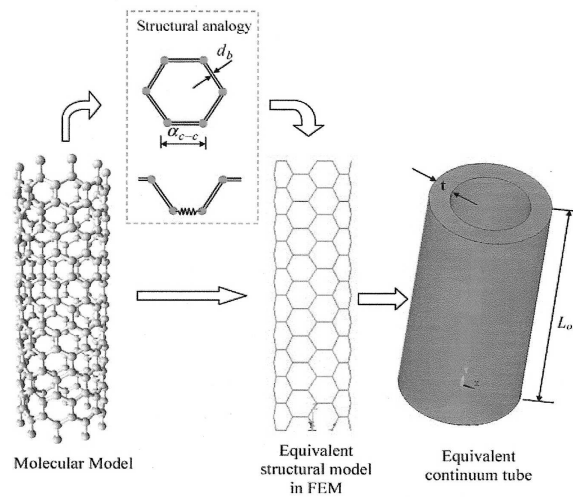


Figura 1.4 Modelos: molecular, numérico e contínuo[33]

Conforme o estudo [64],[65] as vibrações em nanotubos de carbono são animadas por altas frequências, acima de 1Thz. Entre os diversos modelos elásticos contínuos aplicados nos estudos sobre vibrações e ondas sonoras em nanotubos de carbono, destacamos os modelos da viga de Euler-Bernolli e o modelo da viga de Timoshenko. Segundo Yoon e outros [66], os efeitos da inércia de rotação e do cisalhamento são significativos no estudo de frequências de alta ordem (Thz), desta forma o Modelo de Timoshenko é preferencial.

Inicialmente no capítulo 2, o modelo da viga de Timoshenko é construído pela formulação newtoniana do balanço de forças e, também, com o uso da formulação hamiltoniana relativa à variação estacionária da energia do sistema. Após o acoplamento com a força de van der Waals, o modelo é escrito na forma matricial conservativa com a introdução de uma matriz tipo massa e uma matriz tipo rigidez, a última é definida como um operador diferencial de segunda ordem. As condições de contorno, também são escritas de maneira matricial, observando que são as mesmas em cada camada e, portanto os coeficientes matriciais são matrizes bloco.

No capítulo 3, é considerada a análise modal que leva a um problema de autovalor dinâmico, uma vez que envolve a resolução de uma equação diferencial matricial. Este estudo é realizado com o uso de uma base matricial gerada pela função de Green matricial de valor inicial $h(x)$, conforme Claeysen apresenta em [7] e [11]. Esta função permitirá obter a equação característica em termos de uma função escalar $d(x)$ e suas derivadas. O caso de um sistema bi-apoiado é considerado conforme [2] ou [66]. O cálculo não-espectral de $h(x)$ pode ser realizado em termos da função $d(x)$ e suas derivadas até a ordem oito.

Para aproximarmos $d(x)$ neste trabalho, consideramos o estudo dos métodos de Clenshaw [14] e de Urabe [54],[55], para a solução de equações diferenciais ordinárias em termos de Série de Chebyshev, seguindo a linha introduzida por Lanczos [38] [37]. O método apresentado por Clenshaw, consiste em representar a solução da equação diferencial ordinária em uma série finita de Chebyshev com coeficientes a serem determinados através de uma recursão com coeficientes variáveis. Esta recursão é formada com auxílio de uma matriz obtida pela introdução de um operador em diferenças modificado. Conforme a definição dos polinômios de Chebyshev, a solução é assumida no intervalo $[-1, 1]$. Para um intervalo finito qualquer, é realizada uma transformação da variável independente para o intervalo de definição dos polinômios de Chebyshev. Urabe apresenta uma metodologia para a aproxi-

mação de problemas de valores de contorno e valores iniciais, juntamente com uma estimativa do erro para estas aproximações e a convergência das aproximações, com série de Chebyshev [54].

Neste trabalho formulamos os métodos que envolvem a Série de Chebyshev de Clenshaw e de Urabe, para obter a solução aproximada da função $d(x)$. Assim o quarto capítulo, deste trabalho, irá apresentar algumas definições e propriedades dos polinômios de Chebyshev de primeira e segunda espécie, além de fazer algumas considerações sobre o truncamento da série de Chebyshev conforme Urabe em [55]. No último capítulo, o método de Clenshaw é formulado de maneira matricial e o método de Urabe é aplicado ao problema de valor inicial de ordem oito, através de um sistema de primeira ordem. Ambos métodos fazem uso da propriedade de recorrência dos coeficientes das derivadas da série de Chebyshev com os da série original da solução.

2 O MODELO DE TIMOSHENKO EM NANOTUBOS DE CARBONO

Como já é conhecido o modelo da viga de Euler-Bernolli desconsidera os efeitos do cisalhamento e da rotação e neste caso a teoria das vigas de Timoshenko pode ser mais exata a nível de terahertz (10^{12}). Por esta razão Yoon [66] considera questionável o modelo de Euler-Bernolli aplicados a CNT's. Para nanotubos duplos (DWNT) ou nanotubos com múltiplas paredes concêntricas (MWNTs), os modelos contínuos mais utilizados na literatura supõem que todos os tubos aninhados de um MWNT permanecem coaxiais durante a deformação e assim podem ser descritos por um único modelo de deflexão. Entretanto, este modelo não pode ser usado para descrever a vibração relativa entre tubos adjacentes dos MWNTs. Foi proposto por [65] que os encaixes dos tubos concêntricos sejam considerados como vigas individuais, e que as deflexões de todos os tubos aninhados sejam acopladas através da força de interação de van der Waals entre dois tubos adjacentes [6],[9]. Assim cada um dos tubos interiores e exteriores é modelado como um viga.

2.1 Derivação do Modelo de Timoshenko

A derivação das equações de campo para a extensão, torsão e flexão em vigas que utilizam conceitos da mecânica dos materiais está baseada sobre hipóteses cinemáticas e sobre a natureza do campo da deformação. Essas suposições são utilizadas concomitantemente com equações de deformação-esforço, stress-esforço e equilíbrio dinâmico para obter as equações para o campo das deformações. A teoria clássica para a deformação de uma viga devido a Euler-Bernoulli, pressupõe que no estado de não deformação, os centróides de todas as seções transversais estão situados numa mesma reta, a distância ao longo da viga é denotada pela variável espacial x . As dimensões da seção transversal devem ser pequenas em comparação com o

comprimento. Também, que a seção transversal varia lentamente na direção espacial. A hipótese cinemática fundamental para a teoria clássica é que a seção transversal planar mantém sua forma e permanece perpendicular ao eixo do centróide conforme a viga é deformada. Assim, a rotação é pequena numa aproximação linear e pode ser aproximada pela inclinação do eixo do centróide. Por outro lado, resulta que para vibrações flexurais, o momento fletor depende somente do deslocamento transversal e da força de cisalhamento do momento fletor. Timoshenko propôs uma teoria para vigas que adicionasse os efeitos da distorção de cisalhamento e a inércia rotatória ao modelo de Euler- Bernoulli. A sua derivação será feita a seguir segundo a formulação newtoniana e a formulação variacional de Hamilton [25], [28],[45].

2.1.1 Formulação Newtoniana

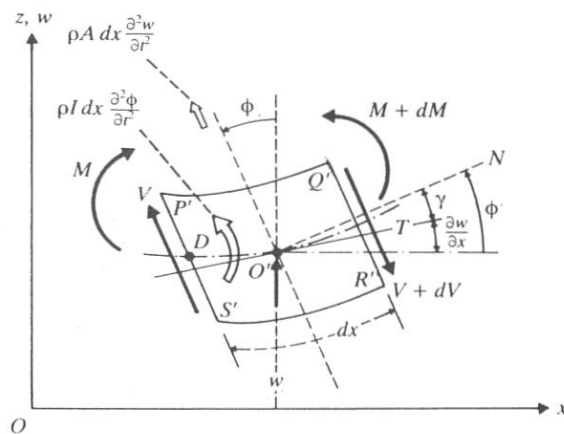


Figura 2.1 seção de uma viga

Na figura (2.1), num elemento pequeno da viga, considera-se a aproximação cinemática para o campo de deslocamento u . O ângulo de deformação pelo cisalhamento, γ , é o ângulo entre a deformação da linha tangente $O'T$ e a normal da face $O'N$, o qual é nulo na teoria clássica de Euler-Bernoulli, corresponde a diferença

entre o ângulo de rotação φ da seção transversal e o giro (declividade da curvatura de deformação):

$$\gamma = \varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.1)$$

O momento fletor M e a força de cisalhamento V , que agora dependem do ângulo φ e do deslocamento lateral devido a deflexão, u , são definidos conforme [45] por

$$M = EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (2.2)$$

onde E , I representam o módulo de Young e o momento de inércia, respectivamente. Conforme [45], temos módulo o da força de cisalhamento dado por,

$$V = \kappa AG \gamma = \kappa AG \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.3)$$

onde G denota o módulo de cisalhamento, A é a área da seção e κ é um coeficiente de correção, que é chamado de *coeficiente de cisalhamento de Timoshenko*, e assume valores entre 0,6–0,7 para paredes circulares delgadas e de 0.9 para seções circulares transversais sólidas.

Suponha-se que $f(t, x)$ é uma força uniformemente distribuída na viga.

Fazendo o balanço de forças, resultam:

PELA TRANSLAÇÃO NA DIREÇÃO DE Z

$$\begin{aligned} \rho A(x) dx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= -[V(t, x) + dV(t, x)] + f(t, x) dx + V(t, x) \\ &= -dV(t, x) + f(t, x) dx. \end{aligned}$$

De (2.3), vem

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\kappa AG \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right].$$

Portanto

$$\rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\kappa AG \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + f(t, x). \quad (2.4)$$

POR ROTAÇÃO NA LINHA PASSANDO NO PONTO D E PARALELA AO EIXO y

$$\begin{aligned}\rho I(x) dx \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= [M(t, x) + dM(t, x)] + [V(t, x) + dV(t, x)] dx + f(t, x) dx \frac{dx}{2} - M \\ &= dM(t, x) + V(t, x) dx + f(t, x) dx \frac{dx}{2} + dV(t, x) dx.\end{aligned}$$

Desconsiderando o termo $dV dx$ e o termo quadrático em dx , resulta:

$$\rho I dx \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = dM + V dx.$$

Da relação (2.2) para o momento fletor, segue:

$$\frac{dM}{dx} = EI \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}.$$

Portanto:

$$\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = EI \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \kappa AG \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (2.5)$$

As equações (2.4) e (2.5) consistem no Modelo de Timoshenko, onde ρ é a densidade do material.

2.1.2 Formulação Hamiltoniana

Outra maneira de obter as equações do modelo de Timoshenko é com o uso do Princípio de Hamilton, o qual estabelece a estacionariedade da função

$$J = \int_{t_a}^{t_b} (\mathcal{K} - \mathcal{V} - \mathcal{W}) d\tau, \quad (2.6)$$

onde \mathcal{K} é a energia cinética, \mathcal{V} é a energia potencial e \mathcal{W} é o trabalho realizado pelas as forças externas.

A energia cinética da translação e rotação da viga é dada pela expressão

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \int_0^L \rho A \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L \rho I \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 dx. \quad (2.7)$$

A variação ¹ da energia cinética pode ser escrita como sendo

$$\delta \mathcal{K} = \int_0^L \rho A \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \delta \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) dx + \int_0^L \rho I \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) dx. \quad (2.8)$$

A energia potencial devido a flexão e ao cisalhamento vem dada por,

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int_0^L EI \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L \kappa AG \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right)^2 dx; \quad (2.9)$$

e sua variação é dada por,

$$\delta \mathcal{V} = \int_0^L EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx + \int_0^L \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \delta \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) dx. \quad (2.10)$$

O trabalho \mathcal{W} , devido a forças transversais não-conservativas por unidade de comprimento $f(t, x)$ na direção do deslocamento transversal $u(t, x)$, é dado por

$$\mathcal{W} = \int_0^L f(t, x) u(t, x) dx; \quad (2.11)$$

e sua variação é dada pela seguinte expressão:

$$\delta \mathcal{W} = \int_0^L f(t, x) \delta u(t, x) dx. \quad (2.12)$$

¹Aqui $\delta J = \frac{\partial J}{\partial \epsilon}$ quando as variáveis u, φ variam ao longo de uma reta ($u + \epsilon U, \varphi + \epsilon \Phi$) com os incrementos U e Φ nulos nos tempos extremos da trajetória.

Aplicando o princípio de Hamilton $\delta J = 0$, resulta

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta\mathcal{K} - \delta\mathcal{V} + \delta\mathcal{W})dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \left[\rho A \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \delta \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) + \rho I \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) \delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) - \right. \\ \left. EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \delta \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) + f \delta u \right] dx dt = 0. \quad (2.13)$$

Alterando a ordem de integração entre x e t , sendo que os operadores de variação e diferenciais são comutativos, e integrando por partes em relação a t , segue

$$\int_{t_1}^{t_2} \rho A \frac{\partial u}{\partial t} \delta \frac{\partial u}{\partial t} dt = \rho A \frac{\partial u}{\partial t} \delta u \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \delta u dt = - \int_{t_1}^{t_2} \rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \delta u dt.$$

Similarmente,

$$\int_{t_1}^{t_2} \rho I \frac{\partial \varphi}{\partial t} \delta \varphi dt = - \int_{t_1}^{t_2} \rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \delta \varphi dt$$

visto que os incrementos δu , $\delta \varphi$ são nulos quando $t = t_1$ e $t = t_2$. Integrando na variável espacial, segue:

$$\int_0^L EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \delta \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int_0^L EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \delta \varphi dx = \left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \delta \varphi \Big|_0^L - \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} \left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \delta \varphi dx;$$

$$\int_0^L \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \delta \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) dx = \int_0^L \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \delta u - \delta \varphi \right) dx \\ = \left[\kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \right] \delta u \Big|_0^L - \int_0^L \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \right] \delta u + \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \delta \varphi \right\} dx.$$

Reorganizando (2.13), resulta:

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} (\delta\mathcal{K} - \delta\mathcal{V} + \delta\mathcal{W}) dt &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\int_0^L \left\langle \left\{ \kappa GA \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) - \rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + f \right\} + \delta u \right. \right. \\
&\quad + \left\langle \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \right] - \rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right\rangle \delta \varphi \rangle dx \\
&\quad \left. - \left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \delta \varphi \Big|_0^L - \kappa GA \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \varphi \right) \delta u \Big|_0^L \right] dt = 0.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Como os deslocamentos $\delta\varphi$ e δu são arbitrários e independentes, podem ser escolhidos iguais a zero em $x = 0$ e $x = L$ e arbitrários para $0 < x < L$. Assim:

$$\rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(-\kappa GA \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right) + f(t, x) \tag{2.15}$$

$$\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \kappa GA \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \tag{2.16}$$

quando

$$\left(EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \delta \varphi \Big|_0^L = 0 \tag{2.17}$$

$$-\kappa GA \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \delta u \Big|_0^L = 0. \tag{2.18}$$

As condições de contorno nas extremidades são obtidas das relações (2.18).

Para vigas presas nas extremidades, a deflexão e rotação são zero, ou

$$u(t, 0) = 0 \quad \varphi(t, 0) = 0$$

$$u(t, L) = 0 \quad \varphi(t, L) = 0.$$

No caso em que a viga está apoiada em ambas extremidades (*simplesmente apoiada*), as condições de contorno são

$$\begin{aligned} u(t, 0) = 0 \quad EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=0} &= 0 \\ u(t, L) = 0 \quad EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=L} &= 0. \end{aligned}$$

Têm-se uma condição geométrica e uma condição natural em cada extremidade.

Para viga livre na extremidade, sem deflexão e rotação, temos que

$$EI \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0 \quad -\kappa GA \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \delta u \Big|_{x=L} = 0.$$

Estas condições refletem o fato do momento de flexão e a força de cisalhamento que desaparecem nas extremidades livres.

2.2 Formulação do Problema

Seja o modelo de Timoshenko aplicado a um nanotubo:

$$\rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -GA\kappa \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \quad (2.19)$$

$$\rho I \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = EI \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - GA\kappa \left(\varphi - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.20)$$

onde x é a coordenada axial, t é tempo, I e A são o momento de inércia e a área de seção transversal da viga, respectivamente, E e G são o módulo de Young e o módulo de cisalhamento, respectivamente, ρ é a densidade, massa por unidade de volume, e κ é o coeficiente de correção de cisalhamento, que é aproximadamente 0,6-0,7 para seções transversais com paredes circulares finas e 0,9 para seções transversais circu-

lares sólidas.

Na análise de nanotubos de parede dupla (DWNTs) com o uso do modelo de Timoshenko, assume-se que dois tubos possuem diâmetros interno e externo d_1 , d_2 , respectivamente, e são de comprimento L . Segundo Yoon e outros (2002),

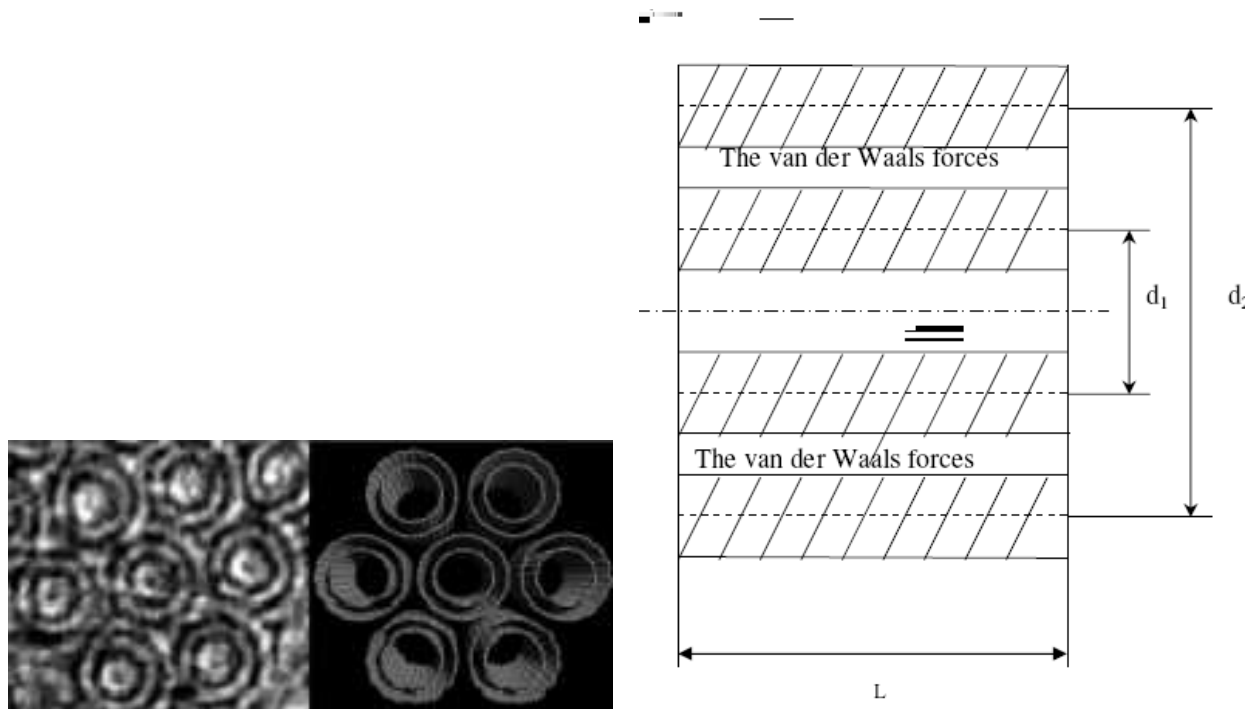


Figura 2.2 Nanotubo de carbono de parede dupla

[64], [62], ao contrário da modelagem que considera que todos os tubos originalmente concêntricos de um MWNT permanecem coaxiais durante a vibração do MWNT, um modelo de multi parede considera a interação radial entre os deslocamentos e curvas individuais da deflexão dos tubos aninhados dentro do MWNT. Assim cada um dos tubos interno e externo de DWNTs são modelados como um viga elástica de Timoshenko sujeita à pressão axial e de interação de van der Waals. A aplicação das equações de Timoshenko (2.20) a cada um dos tubos interno e exterior de um DWNT, fornecem as seguintes equações para a vibração transversal de um nanotubo

de carbono de parede dupla:

$$\begin{aligned}
 \rho A_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= -GA_1 \kappa \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial x} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \right) + p \\
 \rho I_1 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial t^2} &= EI_1 \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial x^2} - GA_1 \kappa \left(\varphi_1 - \frac{\partial u_1}{\partial x} \right) \\
 \rho A_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= -GA_2 \kappa \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial x} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} \right) - p \\
 \rho I_2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial t^2} &= EI_2 \frac{\partial^2 \varphi_2}{\partial x^2} - GA_2 \kappa \left(\varphi_2 - \frac{\partial u_2}{\partial x} \right)
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

onde p é a pressão de interação de van der Waals entre os dois tubos por unidade axial de comprimento e os subíndices 1 e 2 referem-se às variáveis nos tubos interior e exterior, respectivamente. É considerado que cada tubo possui o mesmo módulo de Young de 1 TPa, módulo de cisalhamento de 0,4 TPa, razão de Poisson de 0,25, coeficiente de cisalhamento de 0,8, e densidade de massa de $2,3g/cm^3$ com a efetiva largura de 0,35 nm. A deformação dos dois tubos é acoplada através da força de Van der Waals $p = c(u_2 - u_1)$, onde c é o coeficiente de Van der Waals para a pressão de interação linear por unidade axial de largura. O coeficiente c é dado pela expressão

$$c = \frac{400\bar{r}erg/cm^2}{0,16D^2},$$

onde $D = 1,42 \times 10^{-8}cm$, é distância entre dois átomos de carbono ($C - C$), e $\bar{r} = \frac{1}{4}(d_1 + d_2)$ [59]. Do ponto de vista da mecânica estrutural, o efeito da força de van der Waals é representado por molas distribuídas com rigidez c , atachadas na interface do tubo interno e externo do DWNT (Fig.2.3). Os momentos de inércia e área do tubo interior e tubo exterior são dados por

$$\begin{aligned}
 I_k &= \frac{1}{2} \left[\left(R_k + \frac{r}{2} \right)^4 - \left(R_k - \frac{r}{2} \right)^4 \right] \\
 A_k &= \pi \left[\left(R_k + \frac{r}{2} \right)^2 - \left(R_k - \frac{r}{2} \right)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

2.2.1 Formulação matricial

O sistema de equações para as vibrações das paredes em um nanotubo de carbono duplo, pode ser escrito de maneira compacta utilizando uma forma matricial. Definindo as matrizes

$$M = \begin{pmatrix} \rho A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho I_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho A_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho I_2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} GA_1 \kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & EI_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & GA_2 \kappa & 0 \\ 0 & 0 & 0 & EI_2 \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -GA_1 \kappa & 0 & 0 \\ GA_1 \kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GA_2 \kappa \\ 0 & 0 & GA_2 \kappa & 0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} -c & 0 & c & 0 \\ 0 & -GA_1 \kappa & 0 & 0 \\ c & 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GA_2 \kappa \end{pmatrix},$$

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \varphi_1 \\ u_2 \\ \varphi_2 \end{pmatrix},$$

o sistema (2.21), escreve-se

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \left(B \frac{\partial}{\partial x^2} + C \frac{\partial}{\partial x} + T \right) u \quad (2.23)$$

ou

$$M u_{tt} + K u = 0, \quad (2.24)$$

onde K é definido como sendo o operador diferencial:

$$K = - \left(B \frac{\partial}{\partial x^2} + C \frac{\partial}{\partial x} + T \right).$$

As condições de contorno homogêneas e separadas em cada camada:

$$\begin{aligned} a_{11}u_1(t, 0) + a_{12}\varphi_1(t, 0) + j_{11}u_1'(t, 0) + j_{12}\phi_1'(t, 0) &= 0 \\ a_{21}u_1(t, 0) + a_{22}\varphi_1(t, 0) + j_{21}u_1'(t, 0) + j_{22}\phi_1'(t, 0) &= 0 \\ a_{33}u_2(t, 0) + a_{34}\varphi_2(t, 0) + j_{33}u_2'(t, 0) + j_{34}\phi_2'(t, 0) &= 0 \\ a_{43}u_2(t, 0) + a_{44}\varphi_2(t, 0) + j_{43}u_2'(t, 0) + j_{44}\phi_2'(t, 0) &= 0 \\ f_{11}u_1(t, L) + f_{12}\varphi_1(t, L) + q_{11}u_1'(t, L) + q_{12}\phi_1'(t, L) &= 0 \\ f_{21}u_1(t, L) + f_{22}\varphi_1(t, L) + q_{21}u_1'(t, L) + q_{22}\phi_1'(t, L) &= 0 \\ f_{33}u_2(t, L) + f_{34}\varphi_2(t, L) + q_{33}u_2'(t, L) + q_{34}\phi_2'(t, L) &= 0 \\ f_{43}u_2(t, L) + f_{44}\varphi_2(t, L) + q_{43}u_2'(t, L) + q_{44}\phi_2'(t, L) &= 0. \end{aligned}$$

Também podem ser escritas na forma matricial [6]

$$Au(t, 0) + Ju_t(t, 0) = 0 \tag{2.25}$$

$$Fu(t, L) + Qu_t(t, L) = 0.$$

No caso de tubos bi-apoiados tem-se as seguintes condições de contorno, por exemplo:

$$u_i(t, 0) = u_i(L, t) = 0 \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial \varphi_i(t, 0)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_i(t, L)}{\partial x} = 0.$$

Introduzindo as seguintes matrizes:

$$\begin{aligned}
 A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & J &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
 F &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & Q &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{2.27}$$

as condições de contorno podem ser escritas na forma matricial (2.25).

3 MODOS

Os modos de vibração $v(x)$ do modelo (2.21) ou (2.24) estão associados com as soluções do tipo exponencial

$$u(t, x) = e^{t\lambda}v(x), \quad v = \begin{pmatrix} V_1 \\ \varphi_1 \\ V_2 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

que satisfazem as condições de contorno (2.24).

Substituindo (3.1) em (2.24), segue

$$(\lambda^2 M + K)v = 0$$

ou, equivalentemente

$$B \frac{\partial^2 v(x)}{\partial x^2} + C \frac{\partial v(x)}{\partial x} + (T - \lambda^2 M)v(x) = 0.$$

Similarmente, substituindo nas condições de contorno, resulta

$$\begin{aligned} Av(0) + Jv(0) &= 0 \\ Fv(L) + Qv'(L) &= 0. \end{aligned}$$

Então, obtêm-se o seguinte problema de autovalor:

$$B \frac{d^2 v}{dx^2} + C \frac{dv}{dx} + (T - \lambda^2 M)v(x) = 0 \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} Av(0) + Jv'(0) &= 0 \\ Fv(L) + Qv'(L) &= 0, \end{aligned}$$

onde os coeficientes matriciais da equação diferencial são as matrizes

$$M = \begin{pmatrix} \rho A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho I_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho A_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho I_2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} GA_1\kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & EI_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & GA_2\kappa & 0 \\ 0 & 0 & 0 & EI_2 \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -GA_1\kappa & 0 & 0 \\ GA_1\kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GA_2\kappa \\ 0 & 0 & GA_2\kappa & 0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} -c & 0 & c & 0 \\ 0 & -GA_1\kappa & 0 & 0 \\ c & 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GA_2\kappa \end{pmatrix}.$$

As matrizes A, J, F, Q dependem da natureza das condições de contorno [6],[15],[53].

Dizemos que $v(x)$ é uma *autofunção* ou *modo* que corresponde ao *autovalor* λ , sempre que esta for uma solução não identicamente nula do problema acima (3.2).

As soluções da equação diferencial matricial de segunda ordem do problema de autovalor podem ser escritas na forma

$$v(x) = h_1(x)c_1 + h_2(x)c_2, \quad (3.3)$$

onde $h_1(x)$ e $h_2(x)$ são matrizes 4×4 que denotam uma base matricial do sistema [10] e [11], isto é, a matriz wrosnkiana de ordem 8×8 num ponto x_0 qualquer é:

$$\begin{pmatrix} h_1(x_0) & h_1'(x_0) \\ h_2(x_0) & h_2'(x_0) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

que possui posto 8 ou, ou seja o determinante é não nulo. Aqui c_1 e c_2 denotam vetores 4×1 . Substituindo na condições de contorno do problema de autovalor (3.2), resulta:

$$A[h_1(0)c_1 + h_2(0)c_2] + J[h'_1(0)c_1 + h'_2(0)c_2] = 0 \quad (3.5)$$

$$F[h_1(L)c_1 + h_2(L)c_2] + Q[h'_1(L)c_1 + h'_2(L)c_2] = 0$$

Matricialmente

$$\mathcal{U}\mathbf{c} = 0 \quad (3.6)$$

onde

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} Ah_1(0) + Jh'_1(0) & Ah_2(0) + Jh'_2(0) \\ Fh_1(L) + Qh'_1(L) & Fh_2(L) + Qh'_2(L) \end{pmatrix}$$

é uma matriz 8×8 com blocos de ordem 4×4 e \mathbf{c} é o vetor 8×1 com linhas bloco 4×1

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

De maneira compacta:

$$\mathcal{U} = \mathbb{B}\Phi \quad (3.8)$$

onde

$$\mathbb{B} = \begin{pmatrix} A & J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F & Q \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\Phi = \begin{pmatrix} h_1(0) & h_2(0) \\ h_1'(0) & h_2'(0) \\ h_1(L) & h_2(L) \\ h_1'(L) & h_2'(L) \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Para obtermos soluções não nulas de (3.5) é necessário e suficiente que

$$\Delta = \det(\mathcal{U}) = 0. \quad (3.11)$$

A equação resultante $\Delta = 0$ é chamada de *equação característica* do modelo (2.24), (2.25).

3.1 Base Fundamental

A matriz Φ de (3.10) simplifica-se escolhendo a *base fundamental*

$$h_1(x) = h(x) \quad h_2(x) = h'(x)$$

onde $h(x)$ é uma matriz de 4×4 que é solução do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{aligned} Bh'' + Ch' + (T - \lambda^2 M)h &= 0 \\ Bh'(0) = I \quad h(0) &= 0. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Resulta

$$\Phi = \begin{pmatrix} 0 & B^{-1} \\ B^{-1} & -B^{-1}CB^{-1} \\ h(L) & h'(L) \\ h'(L) & h''(L) \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Utilizando a matriz das condições de contorno definida em (3.9) como sendo

$$\mathbb{B} = \begin{pmatrix} A & J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F & Q \end{pmatrix}$$

obtem-se

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} JB^{-1} & AB^{-1} - JB^{-1}CB^{-1} \\ Fh(L) + Qh'(L) & Fh'(L) + Qh''(L) \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

3.1.1 Fórmula analítica para $h(x)$

A equação característica $\Delta = \det(\mathcal{U}) = 0$ requer conhecer os valores $h(L)$ e $h'(L)$. A função $h(x)$ tem sido determinada por Claeysen [13] e [8]. Requer-se calcular o polinômio característico

$$P(s) = \det[s^2B + sC + T - \lambda^2M] = \sum_{k=0}^8 b_k(\lambda)s^{8-k}, \quad (3.15)$$

obter a solução $d(x)$ do problema de valor inicial

$$\sum_{k=0}^8 b_k(\lambda)d^{(8-k)}(x) = 0 \quad (3.16)$$

$$d(0) = d'(0) = d''(0) = \dots = d^{(vi)}(0) = 0, \quad b_0d^{(vii)}(0) = 1$$

e obter matrizes h_k a partir do problema matricial de valor inicial em diferenças

$$Bh_{k+2} + Ch_{k+1} + (T - \lambda^2M)h_k = 0 \quad (3.17)$$

$$h_0 = 0 \quad Bh_1 = I.$$

Então,

$$h(x) = \sum_{j=1}^8 \sum_{i=0}^{j-1} b_i d^{(j-1-i)} h_{8-j} \quad (3.18)$$

Supondo que o raio externo é o dobro do raio interno, e $R_1 = r$ e $R_2 = 2R_1$, e utilizando as expressões (2.22) para o momento de inércia e a área, resulta

$$I_1 = 2.5r^4, \quad I_2 = 17r^4$$

$$A_1 = 2\pi r^2 \quad A_2 = 4\pi r^4$$

Então, os coeficientes b_j do polinômio característico são tais que

$$b_1 = b_3 = b_5 = b_7 = 0$$

e

$$b_0 = \alpha_0 \quad (3.19)$$

$$b_2 = \alpha_2 \lambda^2 + \beta_2 \quad (3.19)$$

$$b_4 = \alpha_4 \lambda^4 + \beta_4 \lambda^2 + \mu_4 \quad (3.20)$$

$$b_6 = \alpha_6 \lambda^6 + \beta_6 \lambda^4 + \mu_6 \lambda^2 \quad (3.21)$$

$$b_8 = \alpha_8 \lambda^8 + \beta_8 \lambda^6 + \mu_8 \lambda^4 + \nu_8 \lambda^2 \quad (3.22)$$

onde

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= 42.5 \sigma^2 E^2 r^8 + 340 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^{12} E^2 + 255 \kappa G \pi r^{10} E^2 \sigma \\
\alpha_2 &= -680 G^2 \kappa^2 \pi^2 r^{12} E \rho - 680 G \kappa \pi^2 r^{12} E^2 \rho \\
\alpha_4 &= 42.5 \sigma^2 \rho^2 r^8 + 510 \sigma E r^{10} \rho^2 \pi + 340 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^{12} \rho^2 \\
&\quad + 255 \kappa G \pi r^{10} \rho^2 \sigma + 1360 \kappa G \pi^2 r^{12} E \rho^2 + 340 \rho^2 \pi^2 r^{12} E^2 \\
\alpha_6 &= -255 \sigma \rho^3 r^{10} \pi - 680 \kappa G \pi^2 r^{12} \rho^3 - 680 \rho^3 \pi^2 r^{12} E \\
\alpha_8 &= 340 \rho^4 \pi^2 r^{12} \\
\beta_2 &= -85 \kappa G \pi r^{10} E^2 c - 156 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^8 E \sigma - 44 \sigma^2 E r^6 \kappa G \pi \\
\beta_4 &= 264 \sigma E r^8 \rho \pi^2 \kappa G + 352 \kappa^2 G^2 \pi^3 r^{10} E \rho + 85 c E^2 r^{10} \rho \pi \\
&\quad + 156 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^8 \sigma \rho + 170 \kappa G \pi r^{10} E c \rho + 44 \sigma^2 \kappa G \pi r^6 \rho \\
\beta_6 &= -352 \kappa^2 G^2 \pi^3 r^{10} \rho^2 - 85 \kappa G \pi r^{10} \rho^2 c - 264 \sigma \kappa G \pi^2 r^8 \rho^2 \\
&\quad - 170 c E r^{10} \rho^2 \pi - 352 \rho^2 \pi^3 r^{10} E \kappa G \\
\beta_8 &= 85.000 c \rho^3 r^{10} \pi + 352.00 \rho^3 \pi^3 r^{10} \kappa G \\
\mu_4 &= 116 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^8 E c + 8. \sigma^2 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^4 \\
\mu_6 &= -116 \kappa^2 G^2 \pi^2 r^8 c \rho - 88 c E r^8 \rho \pi^2 \kappa G - 48 \sigma \kappa^2 G^2 \pi^3 r^6 \rho \\
\mu_8 &= 64 \rho^2 \pi^4 r^8 \kappa^2 G^2 + 88 c \kappa G \pi^2 r^8 \rho^2 \\
\nu_8 &= 16 c \kappa^2 G^2 \pi^3 r^6 \lambda^2 \rho
\end{aligned}$$

As matrizes h_k , $k = 1 : 7$ podem ser geradas por simples recursão a partir da equação matricial em diferenças (3.17). O problema de valor inicial (3.16) com os coeficientes b_j obtidos acima pode ser resolvido com os métodos de aproximação introduzido por Clenshaw [14] ou Urabe [55] que utilizam os polinômios de Chebyshev.

3.2 O Caso Bi-Apoiado

Para o caso de uma viga bi-apoiada tem-se deslocamento o giro nulos nos extremos da viga:

$$u_1(t, 0) = u_1(t, L) = 0, \quad \frac{\partial \varphi_1(t, 0)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_1(t, L)}{\partial x} = 0 \quad (3.23)$$

$$u_2(t, 0) = u_2(t, L) = 0, \quad \frac{\partial \varphi_2(t, 0)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_2(t, L)}{\partial x} = 0. \quad (3.24)$$

Resulta que a matriz \mathcal{B} com os coeficientes das condições de contorno (3.9) possui os blocos

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

e $F = A$, $Q = J$. Para o caso bi-apoiado, as quatro primeiras linhas da matriz (3.14) são

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\kappa G \pi r^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{5r^4 E} & 0 & 0 & \frac{2}{5r^4 E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4\kappa G \pi r^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{17r^4 E} & 0 & 0 & \frac{1}{17r^4 E} & 0 \end{pmatrix},$$

onde c é o vetor de colunas

$$c_1 = \begin{pmatrix} c_{11} \\ c_{12} \\ c_{13} \\ c_{14} \end{pmatrix}, \quad c_2 = \begin{pmatrix} c_{21} \\ c_{22} \\ c_{23} \\ c_{24} \end{pmatrix}.$$

Então as quatro primeiras linhas da matriz Uc serão

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \frac{c_{21}}{\kappa G \pi r^2} \\ \frac{2}{5} \frac{c_{12}}{r^4 E} + \frac{2}{5} \frac{c_{21}}{r^4 E} \\ \frac{1}{4} \frac{c_{23}}{\kappa G \pi r^2} \\ \frac{1}{17} \frac{c_{14}}{r^4 E} + \frac{1}{17} \frac{c_{23}}{r^4 E} \end{pmatrix}$$

e resulta que c possui as componentes nulas $c_{12} = c_{14} = c_{21} = c_{23} = 0$. Com isto, o problema de autovalor com a matriz U de ordem 8×8 é reduzido para um problema de autovalor com matriz de coeficientes de ordem 4×4

$$(Fh(L) + Qh'(L))c_1 + (Fh'(L) + Qh''(L))c_2 =$$

$$\begin{pmatrix} h_{11}(L) & h_{13}(L) & h'_{12}(L) & h'_{14}(L) \\ h'_{21}(L) & h'_{23}(L) & h''_{22}(L) & h''_{24}(L) \\ h_{31}(L) & h_{33}(L) & h'_{32}(L) & h'_{34}(L) \\ h'_{41}(L) & h'_{43}(L) & h''_{42}(L) & h''_{44}(L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{11} \\ c_{13} \\ c_{22} \\ c_{24} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Onde $h = (h_{ij})$, $h' = (h'_{ij})$ e $h'' = (h''_{ij}) = -B^{-1}Ch' - B^{-1}(T - \lambda^2 M)h$ são matrizes de ordem 4×4 . Resulta que a equação caraterística do problema de autovalor para uma viga bi-apoiada é obtida fazendo nulo o determinante da matriz do sistema (3.25).

3.2.1 Freqüências obtidas pelo método espectral

É conhecido que numa viga bi-apoiada simple, as condições de contorno são satisfeitas com funções trigonométricas. No caso de duas vigas biapoiadas acopladas pela força de van der Waals, as condições de contorno poderiam ser satisfeitas de maneira análoga, ou seja substituindo nas condições de contorno

$Av(0) + Jv'(0) = 0$, $Av(L) + Jv'(L) = 0$, a função

$$v(x) = \begin{pmatrix} a_1 \sin(\alpha x) \\ b_1 \cos(\alpha x) \\ a_2 \sin(\alpha x) \\ b_2 \cos(\alpha x) \end{pmatrix} = \sin(\alpha x)\bar{a} + \cos(\alpha x)\bar{b}, \quad \bar{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ a_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \bar{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ b_1 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Resulta que a primeira condição de contorno $Av(0) + Jv'(0) = A\bar{b} + J(\alpha\bar{a}) = 0$, é satisfeita, pois $A\bar{b} = 0$, $J\bar{a} = 0$. Substituindo na segunda condição de contorno, resulta

$$A\bar{a} \sin(\alpha L) - \alpha J\bar{b} \sin(\alpha L) = (\bar{a} - \alpha\bar{b}) \sin(\alpha L) = 0.$$

Portanto, as condições de contorno serão satisfeitas sempre que

$$\alpha = \frac{n\pi}{L}.$$

Assim,

$$v(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \bar{a} + \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \bar{b}. \quad (3.26)$$

Considere-se o produto interno

$$\begin{aligned} \langle v, u \rangle &= \int_0^L v^t u dx \\ &= \int_0^L (v_1 u_1 + \phi_1 \varphi_1 + v_2 u_2 + \phi_2 \varphi_2) dx \end{aligned} \quad (3.27)$$

para

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \phi_1 \\ v_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \varphi_1 \\ u_2 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Tendo que $\lambda = i\omega$, substituindo $u = e^{i\omega t}v(x)$ no modelo, resulta $(-\omega^2 M + K)v(x) = 0$. Tomando o produto interno com v^t , obtém-se o quociente de Rayleigh

$$\omega^2 = \frac{v^t K v}{v^t M v} = \frac{v^t B \ddot{v} + v^t C \dot{v} + v^t T v}{v^t M v}. \quad (3.29)$$

Se o efeito de van der Waals for eliminado, então a matriz T será diagonal e seguirá que $\omega^2 < 0$ e por tanto os autovalores seriam puramente imaginários [46]. Considerando o efeito de van der Waals, as frequências naturais poderiam ser determinadas substituindo os modos

$$u = e^{i\omega t}v(x) = e^{i\omega t} \left(\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \bar{a} + \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \bar{b} \right) \quad (3.30)$$

na segunda condição de contorno. Resulta o problema de autovalor $\mathbb{U}\mathcal{C} = 0$, onde

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} \rho A_1 \omega^2 - \kappa A_1 G \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - c & \kappa A_1 G \left(\frac{n\pi}{L}\right) & c & 0 \\ \kappa A_1 G \left(\frac{n\pi}{L}\right) & \rho I_1 \omega^2 - EI_1 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - \kappa A_1 G & 0 & 0 \\ c & 0 & \rho A_2 \omega^2 - \kappa A_2 G \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - c & \kappa A_2 G \left(\frac{n\pi}{L}\right) \\ 0 & 0 & \kappa A_2 G \left(\frac{n\pi}{L}\right) & \rho I_2 \omega^2 - EI_2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - \kappa A_2 G \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

As simulações, considerando o efeito de van der Waals, mostram que conforme n aumenta em um raio de aspecto 10, 20, 50, observa-se que as frequências aumentam com o número de modo.

4 POLINÔMIOS DE CHEBYSHEV

Na resolução da equação diferencial em (3.16), serão formulados métodos que utilizam a expansão em série com polinômios de Chebyshev e algumas de suas propriedades. Com estes métodos serão obtidas aproximações para as derivadas de $d(x)$ e cujos coeficientes na suas expansões das derivadas, podem ser determinados em termos dos coeficientes da expansão de $d(x)$.

4.1 Definições e Propriedades

Na fórmula de Moivre

$$(\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos(n\theta) + i \sin(n\theta),$$

fazendo $x = \cos \theta$ e supondo $0 \leq \theta \leq \pi$, resulta na forma cartesiana

$$(\cos(n\theta) + i \sin(n\theta))^n = (x + i\sqrt{1-x^2})^n. \quad (4.1)$$

Expandindo esta expressão pelo Teorema Binomial, e tomando a parte real, que corresponde às potências pares de i , resulta

$$\begin{aligned} \cos(n \arccos x) &= \cos(n\theta) = \sum_{p=0}^{[n/2]} \binom{n}{2p} x^{n-2p} (x^2 - 1)^p \\ &= x^n + \binom{n}{2} x^{n-2} (x^2 - 1) + \binom{n}{4} x^{n-4} (x^2 - 1)^2 + \dots \end{aligned}$$

onde $[n/2] = (n - 1)/2$. Assim, $\cos(n\theta)$ é um certo polinômio de grau n em $x = \cos(\theta)$.

Definição 4.1. *O polinômio de Chebyshev de primeira espécie de ordem n , $T_n(x)$, é definido como sendo*

$$T_n(x) = \cos(n(\arccos x)) = \cos(n\theta). \quad (4.2)$$

Se x varia no intervalo $[-1, 1]$, θ varia no intervalo $[0, \pi]$ e esta variação segue em direção oposta, já que $x_N = -1$, corresponde a $\theta = \pi$ e $x_0 = 1$ corresponde a $\theta = 0$.

A relação trigonométrica

$$\cos[(n+1)\theta] + \cos[(n-1)\theta] = 2\cos(\theta)\cos(n\theta)$$

motiva que os polinômios de Chebyshev vem a satisfazer a seguinte relação de recorrência com três termos.

Proposição 4.1.

$$T_{n+1} = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.3)$$

Demonstração

Escrevendo $\theta = \arccos(x)$, segue

$$xT_n(x) = \cos(\theta)\cos(n\theta) = \frac{1}{2}(\cos[(n+1)\theta] + \cos[(n-1)\theta]) = \frac{1}{2}(T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x)).$$

Desta relação resulta que o primeiro coeficiente de um polinômio de Chebyshev $T_N(x)$ é igual 2^{N-1} para todo $N \geq 1$.

□

É fácil calcular os primeiros polinômios de Chebyshev

$$\begin{aligned}
 T_0(x) &= 1 \\
 T_1(x) &= x \\
 T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\
 T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\
 T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1 \\
 T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x.
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

Resulta da definição, que o polinômio de Chebyshev somente possui potências pares quando é de grau par e somente potências ímpares quando é de grau ímpar.

Proposição 4.2. $T_n(x)$ possui zeros simples nos pontos:

$$x_k = \cos \frac{2k-1}{2n} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n. \tag{4.5}$$

Demonstração

$T_n(x) = 0$ se, e somente se, $\cos(n\theta) = 0$. Assim, $n\theta = (2k-1)\frac{\pi}{2}$, $k = 1, \dots, n$.

□

Proposição 4.3. Os polinômios de Chebyshev assumem valores alternados nos extremos do intervalo $[-1, 1]$, isto é

$$T_n(\pm 1) = (\pm 1)^n. \tag{4.6}$$

Demonstração

Se $x = 1$, então pela definição do polinômio de Chebyshev, resulta que $\cos(n\theta) = 1$ somente para $\theta = 2m\pi$, $\forall m \in \mathbb{Z}$, logo $T_n(1) = \cos(2k\pi) = 1$. De forma análoga para $x = -1$.

□

Proposição 4.4. *Os polinômios de Chebyshev satisfazem a equação diferencial*

$$(1 - x^2)T_n''(x) - xT_n'(x) = -n^2T_n(x),$$

ou

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2)^{1/2} \frac{dT_n}{dx} \right) = -\frac{n^2 T_n}{(1 - x^2)^{1/2}}. \quad (4.7)$$

Demonstração

Utilizando a definição e por simples substituição obtemos este resultado.

□

Proposição 4.5. *Para $n \geq 2$,*

$$2T_n(x) = \frac{T_{n+1}'(x)}{n+1} - \frac{T_{n-1}'(x)}{n-1}. \quad (4.8)$$

Demonstração

Sendo $\theta = \arccos(x)$, resulta

$$T_{n+1}(x) = \cos[(n+1)\theta] = \cos[(n+1)\arccos(x)].$$

Então,

$$\frac{d}{dx} T_{n+1} = -(n+1) \frac{\sin[(n+1)\arccos(x)]}{-\sqrt{1-x^2}}. \quad (4.9)$$

Similarmente, para $n \geq 2$

$$\frac{d}{dx}T_{n-1} = (n-1) \frac{\sin[(n-1)\arccos(x)]}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (4.10)$$

Adicionado (4.9) e (4.10), e sendo $\sqrt{(1-x^2)} = \sqrt{1-\cos^2\theta} = \sin\theta$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n+1} \frac{d}{dx}T_{n+1} + \frac{1}{n-1} \frac{d}{dx}T_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} (\sin[(n+1)\theta] - \sin[(n-1)\theta]) \\ &= \frac{2\cos(n\theta)\sin\theta}{\sin\theta} = 2\cos\theta = 2T_n(x). \end{aligned}$$

□

Proposição 4.6. *Para $n \geq 2$ temos*

$$\int T_n(x)dx = \frac{1}{2} \left[\frac{T_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T_{n-1}(x)}{n-1} \right] + C. \quad (4.11)$$

Demonstração

Segue de integração ambos os membros da relação (4.8).

□

O seguinte produto interno será utilizado no espaço das funções contínuas num intervalo $[a, b]$

$$\langle p, q \rangle_w = \int_a^b w(x)p(x)q(x)dx. \quad (4.12)$$

Aqui $w(x)$ é uma função contínua não negativa em (a, b) chamada de *peso*.

Proposição 4.7. *Os polinômios de Chebyshev $T_n(x)$ são ortogonais no intervalo $[-1, 1]$ com relação a função peso*

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (4.13)$$

Demonstração

Fazendo a mudança de variável $x = \cos \theta$ com $dx = -\sin(\theta)d\theta = -\sqrt{1-x^2}d\theta$, segue

$$\langle T_m, T_n \rangle_w = \int_{-1}^1 (1-x^2)^{-\frac{1}{2}} T_m(x) T_n(x) dx = \int_0^\pi \cos(m\theta) \cos(n\theta) d\theta.$$

Da identidade

$$\cos(n\theta) \cos(m\theta) = \frac{1}{2} [\cos[(n+m)\theta] + \cos[(n-m)\theta]], \quad n \neq m$$

resulta

$$\langle T_m, T_n \rangle_w = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos[(n+m)\theta] + \cos[(n-m)\theta]] d\theta$$

$$\langle T_m, T_n \rangle_w = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin[(n+m)\theta]}{n+m} + \frac{\sin[(n-m)\theta]}{n-m} \right]_0^\pi = 0.$$

□

Proposição 4.8.

$$\langle T_m, T_n \rangle_w = \begin{cases} \pi, & m=n=0; \\ \frac{\pi}{2}, & m=n \neq 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

Demonstração

Seja $n = m \neq 0$,

$$\|T_n\|_w^2 = \langle T_n, T_n \rangle_w = \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos(2n\theta) + 1] d\theta = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin(2n\theta)}{2n} + \theta \right]_0^\pi = \frac{\pi}{2}.$$

Agora se $n = m = 0$, segue

$$\|T_0\|_w^2 = \langle 1, 1 \rangle = \pi.$$

Proposição 4.9. $\forall n \geq 1, n \geq 0$:

$$\langle T'_m, T_n \rangle_w = \begin{cases} 0, & m+n \text{ par}; \\ 0, & m+n \text{ ímpar e } m < n; \\ m\pi, & m+n \text{ ímpar e } m > n. \end{cases} \quad (4.15)$$

Demonstração

Da proposição 4.3 vamos ter para $\forall n \geq 2$

$$\frac{T'_{n+1}}{n+1} = 2T_n + \frac{T'_{n-1}}{n-1}.$$

Fazendo agora

$$T'_{n+1} = (n+1) \left[2T_n + \frac{T'_{n-1}}{n-1} \right]$$

e aplicando o mesmo raciocínio vamos ter

$$T'_{n+1} = (n+1) \left[2T_n + \frac{1}{n-1}(n-1) \left(2T_{n-2} + \frac{T'_{n-3}}{n-3} \right) \right].$$

Seja agora n par, repetindo o processo sucessivamente temos,

$$T'_{n+1} = (n+1) \left[2T_n + 2T_{n-2} + \cdots + 2T_2 + \frac{T'_1}{1} \right]$$

determinando e substituindo $T'_1(x)$, temos

$$T_{n+1} = (n+1)(2T_n + 2T_{n-2} + \cdots + 2T_2 + T_0).$$

Conseqüentemente para n ímpar vamos ter

$$T'_{n+1} = (n+1) \left[2T_n + 2T_{n-2} + \cdots + 2T_3 + \frac{T'_2}{2} \right]$$

da mesma forma determinando e substituindo $T'_2(x)$, temos

$$T'_{n+1} = (n+1)(2T_n + 2T_{n-2} + \cdots + 2T_3 + 2x),$$

$$T'_{n+1} = (n+1)(2T_n + 2T_{n-2} + \cdots + 2T_3 + 2T_1).$$

Fazendo agora $k = n + 1$, vamos ter para k ímpar

$$T'_k = 2k \left(T_{k-1} + T_{k-3} + \cdots + T_4 + T_2 + \frac{1}{2}T_0 \right)$$

e para k par

$$T'_k = 2k(T_{k-1} + T_{k-3} + \cdots + T_5 + T_3 + T_1).$$

Seja agora o produto interno $\langle T'_m, T_n \rangle_w$. Temos então:

a) Para m par,

$$\begin{aligned} \langle T'_m, T_n \rangle_w &= \int_{-1}^1 w T'_m T_n dx = 2m \int_{-1}^1 w (T_{m-1} + T_{m-3} + \cdots + T_5 + T_3 + T_1) T_n dx \\ &= 2m \left[\int_{-1}^1 T_{m-1} T_n dx + \int_{-1}^1 w T_{m-3} T_n dx + \cdots + \int_{-1}^1 w T_5 T_n dx + \int_{-1}^1 w T_3 T_n dx + \int_{-1}^1 w T_1 T_n dx \right]. \end{aligned}$$

Da Proposição 4.7 segue que $\langle T'_m, T_n \rangle_w = 0$, o que se verifica se n for par. Agora se $m > n$ e n é ímpar, então da Proposição 4.8 vamos obter em uma das integrais $\frac{\pi}{2}$. Já para $m < n$ com n ímpar, segue imediatamente o resultado pela Proposição 4.7.

b) Para m ímpar,

$$\begin{aligned} \langle T'_m, T_n \rangle_w &= 2m \int_{-1}^1 w \left(T_{m-1} + T_{m-3} + \cdots + T_4 + T_2 + \frac{1}{2}T_0 \right) T_n dx \\ &= 2m \left[\int_{-1}^1 w T_{m-1} T_n dx + \int_{-1}^1 w T_{m-3} T_n dx + \cdots + \int_{-1}^1 w T_4 T_n dx + \int_{-1}^1 w T_2 T_n dx + \int_{-1}^1 \frac{1}{2} w T_0 T_n dx \right] \end{aligned}$$

Novamente da Proposição 4.7, se n for ímpar então $\langle T'_m, T_n \rangle_w = 0$. Agora se $m > n$ e n é par, então da Proposição 4.8 vamos obter em uma das integrais $\frac{\pi}{2}$. Já para $m < n$ com n par, segue imediatamente o resultado pela Proposição 4.7.

Resumindo, temos:

$$\langle T'_m, T_n \rangle_w = \begin{cases} 0, & \text{se } m \leq n; \\ 0, & \text{se } m > n \text{ e } m + n \text{ par;} \\ m\pi, & m > n \text{ e } m + n \text{ ímpar.} \end{cases}$$

ou

$$\langle T'_m, T_n \rangle_w = \begin{cases} 0, & \text{se } m + n \text{ par;} \\ 0, & \text{se } m + n \text{ ímpar e } m < n; \\ m\pi, & m + n \text{ ímpar e } m > n. \end{cases}$$

□

4.1.1 Polinômios de Chebyshev de segunda espécie

A relação trigonométrica

$$\sin[(n+1)\theta] + \sin[(n-1)\theta] = 2\cos(\theta)\sin(n\theta)$$

permite definir os polinômios de Chebyshev de segunda espécie. Observa-se que dividindo por $\sin\theta$, resulta

$$\frac{\sin[(n+1)\theta]}{\sin\theta} + \frac{\sin[(n-1)\theta]}{\sin\theta} = 2\cos\theta \frac{\sin n\theta}{\sin\theta}$$

Por recorrência, resulta que

$$\frac{\sin(n\theta)}{\sin\theta}$$

vem a ser um polinômio de grau n em $x = \cos\theta$.

Definição 4.2. O polinômio de Chebyshev de segunda espécie $U_n(x)$ é um polinômio de grau n em $x = \cos\theta$, definido por

$$U_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\theta]}{\sin(\theta)}. \quad (4.16)$$

Assim, usando relações trigonométricas obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$U_{n+1} = 2xU_n - U_{n-1}, \quad n \geq 1. \quad (4.17)$$

Portanto, os primeiros polinômios de Chebyshev de segunda espécie são

$$U_0(x) = 1$$

$$U_1(x) = 2x$$

$$U_2(x) = 4x^2 - 1$$

$$U_3(x) = 8x^3 - 4x$$

$$U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1$$

$$U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x$$

Da relação de recorrência, segue que o coeficiente do termo x^n do polinômio $U_n(x)$ é igual a 2^n , para $n \geq 0$.

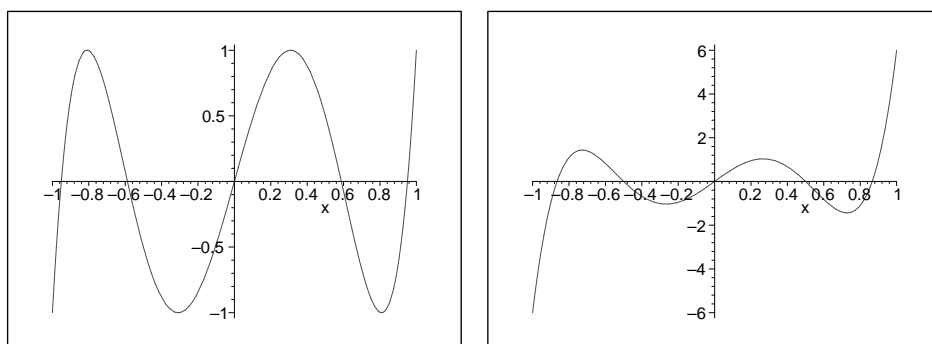


Figura 4.1 Polinômios $T_5(x)$ e $U_5(x)$.

Corolário 4.1. *Sejam os polinômio de Chebyshev $T_n(x)$ e $U_n(x)$, as seguintes relações são satisfeitas:*

$$U_n(x) - U_{n-2}(x) = 2T_n(x) \quad (4.18)$$

$$(1 - x^2)U_n(x) = \frac{1}{2}[T_{n+2} - T_n(x)] \quad (4.19)$$

Demonstração

O primeiro resultado segue imediatamente da seguinte identidade:

$$\sin[(n + 1)\theta] - \sin[(n - 1)\theta] = 2 \sin(\theta) \cos(n\theta).$$

Para o segundo resultado, tem-se que

$$(1 - x^2)U_n(x) = \frac{\sin^2(\theta) \sin[(n + 1)\theta]}{\sin(\theta)} = \sin \theta \sin[(n + 1)\theta]$$

temos ainda a seguinte identidade

$$2 \sin(\theta) \sin[(n + 1)\theta] = \cos[(n + 2)\theta] - \cos(n\theta)$$

o que completa a demonstração.

□

Proposição 4.10. *$U_n(x)$ possui zeros simples nos pontos:*

$$x_k = \cos \frac{k}{n+1} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (4.20)$$

Demonstração

$U_n(x) = 0$ se, e somente se, $\sin((n + 1)\theta) = 0$. Assim, $(n + 1)\theta = k\pi$, $k = 1, \dots, n$.

Observa-se que os zeros do polinômio $(1 - x^2)U_n(x)$ incluem os pontos extremos

$x = -1$ e $x = 1$ e que os pontos extremos de $T_n(x)$ são os do polinômio $(1-x^2)U_{n-1}(x)$ [20].

□

Proposição 4.11. *Para $n \geq 1$, temos:*

$$T'_n(x) = nU_{n-1}(x) \quad (4.21)$$

Demonstração

Dado que $T_n(x) = \cos(n\theta)$ e $\theta = \arccos(x)$, temos daí que

$$\frac{dT_n(x)}{dx} = \frac{d}{d\theta}(\cos(n\theta)) \frac{d\theta}{dx} = \frac{n \sin(n\theta)}{\sin(\theta)},$$

o que completa a demonstração.

□

Proposição 4.12. *Para $n \geq 1$, temos:*

$$T''_n(x) = \frac{n(nT_n(x) - xU_{n-1}(x))}{x^2 - 1} \quad (4.22)$$

Demonstração

Segue que

$$T''_n(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{n \sin(n\theta)}{\sin(\theta)} \right)$$

Assim vamos ter

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{n \sin(n\theta)}{\sin(\theta)} \right) = \left(\frac{n^2 \cos(n\theta) \sin(\theta) - n \cos(\theta) \sin(n\theta)}{\sin^2(\theta)} \right) \frac{d\theta}{dx}.$$

Dado que $x = \cos(\theta)$ segue daí que

$$T_n''(x) = \frac{n^2 \cos(n\theta) \sin(\theta) - n \cos(\theta) \sin(n\theta)}{\sin^3(\theta)}.$$

que resulta em

$$T_n''(x) = \frac{n(nT_n(x) - xU_{n-1}(x))}{x^2 - 1}$$

□

Proposição 4.13. *Os polinômios de Chebyshev $U_n(x)$ são ortogonais no intervalo $[-1, 1]$ com relação à função peso $\mathbf{w}(x) = \sqrt{1 - x^2}$.*

Demonstração

De maneira análoga à demonstração anterior vamos ter para $n \neq m$

$$\langle U_n, U_m \rangle_{\mathbf{w}} = \int_{-1}^1 \sqrt{1 - x^2} U_n(x) U_m(x) dx = \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{-\frac{1}{2}} (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_n(x) (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_m(x) dx.$$

Como $(1 - x^2)^{\frac{1}{2}} U_n(x) = \sin(\theta) U_n(x) = \sin[(n + 1)\theta]$ e $\frac{dx}{\sqrt{1 - x^2}} = d\theta$ segue daí

$$\begin{aligned} \langle U_n, U_m \rangle_{\mathbf{w}} &= \int_0^\pi \sin[(n + 1)\theta] \sin[(m + 1)\theta] d\theta \\ \langle U_n, U_m \rangle_{\mathbf{w}} &= \frac{1}{2} \int_0^\pi [\cos[(m + n + 2)\theta] - \cos[(n - m)\theta]] d\theta = 0. \end{aligned}$$

O que completa a demonstração.

□

4.2 Série de Fourier-Chebyshev

Conforme Lanczos [37], a desvantagem da série de Fourier com funções $f(x)$ que não sejam periódicas é sua convergência vagarosa. Suponha-se que o intervalo de definição é normalizado para $[-1, 1]$. Com mudança de variável

$$x = \cos \theta \quad (4.23)$$

resulta que $F(\theta) = f(\cos \theta)$ é uma função periódica. Sendo $\cos(\theta)$ uma função par, deve-se requerer $F(\theta) = F(-\theta)$ e por tanto, sua expansão de Fourier resulta em cossenos

$$F(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n \cos(n\theta) \quad (4.24)$$

com

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} F(\cos(\theta)) \cos(k\theta) d\theta \quad (4.25)$$

Voltando à variável x , segue

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n T_n(x) \quad (4.26)$$

onde

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 f(x) T_k(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad (4.27)$$

$$u_n = \begin{cases} 0, & n < 0; \\ \frac{1}{2}, & n = 0; \\ 1, & n > 0. \end{cases} \quad (4.28)$$

A discussão sobre a convergência da expansão de Chebyshev (4.26) é reduzida às questões relacionadas com a série clássica de Fourier [19], [50]. Em particular, para

funções limitadas integráveis têm-se convergência quadrática com respeito da norma

$$\|f\|_2 = \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\pi |f(\cos(\theta))|^2 d\theta \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.29)$$

e a validade da igualdade de Parserval

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n^2 = \frac{1}{L} \int_{-L}^L |f(\cos \theta)|^2 d\theta \quad (4.30)$$

ou

$$\|f\|_2^2 = \sum_{n=0}^{\infty} u_n |a_n|^2. \quad (4.31)$$

Quando $f(x)$ é aproximada por uma série finita de Chebyshev, temos então que

$$\|f\|_2 = \|\alpha\| \quad (4.32)$$

onde $\alpha = (a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$ é um vetor. Para funções suaves ou regulares, obtém-se a convergência uniforme com a norma

$$\|f\| = \sup_{x \in [-1, 1]} |f(x)|. \quad (4.33)$$

4.2.1 Derivada da Série de Chebyshev

Seja $f(x)$ uma função continuamente diferenciável no intervalo $[-1, 1]$ e considera-se a série de Chebyshev para sua derivada

$$\frac{d}{dx} f(x) \sim \sum_{n=0}^{\infty} u_n a'_n T_n(x) \quad (4.34)$$

Proposição 4.14. *Seja*

$$f'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a'_n T_n(x). \quad (4.35)$$

Então,

$$a'_n = \sum_{p=0}^{\infty} u_{p-n} v_{p-n} p a_p \quad (4.36)$$

onde

$$v_n = 1 - (-1)^n = \begin{cases} 0, & n \text{ par} \\ 2, & n \text{ impar} \end{cases} \quad (4.37)$$

e a_0, a_1, \dots , são os coeficientes da série de Chebyshev da função

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n T_n(x)$$

Demonstração

Derivando formalmente termo a termo e igualando a sua expansão em série de Chebyshev, decorre

$$f'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n T'_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a'_n T_n(x).$$

Das propriedades da série de Fourier, segue que $\forall n \geq 0$

$$a'_n = \frac{\langle f', T_n \rangle}{\langle T_n, T_n \rangle}$$

Agora, para $n \geq 1$:

$$a'_n = \frac{\langle f', T_n \rangle}{\langle T_n, T_n \rangle} = \frac{2}{\pi} \left\langle \sum_{m=1}^{\infty} a_m T'_m, T_n \right\rangle.$$

Da Proposição 4.9, temos

$$a'_n = \frac{2}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} a_m \langle T'_m, T_n \rangle = \sum_{m=n+1, m+n \text{ impar}}^{\infty} 2m a_m.$$

Portanto, temos:

$$a'_n = \sum_{p=0}^{\infty} u_{p-n} v_{p-n} p a_p.$$

□

Para derivadas de ordem superior temos :

$$\frac{d^s}{dx^s} f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n a_n^{(s)} T_n(x). \quad (4.38)$$

Proposição 4.15. Para $k > 0$, temos

$$a_{k-1}^{(i)} - a_{k+1}^{(i)} = 2k a_k^{(i-1)}. \quad (4.39)$$

Demonstração

Seja $f \in \mathbb{C}^n$, assim

$$\int f^{(n)}(x) dx = f^{(n-1)}(x) + C.$$

Dado que

$$f^{(i)}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} u_m a_m^{(i)} T_m(x),$$

temos então que

$$\int \sum_{m=0}^{\infty} u_m a_m^{(i)} T_m(x) = \sum_{m=1}^{\infty} u_m a_m^{(i-1)} T_m(x) + K_1, \quad (4.40)$$

onde $K_1 = \frac{a_0^{(i)}}{2} T_0$. Considerando o primeiro membro de (4.40), integrando termo a termo e aplicando Proposição 4.6, temos

$$\begin{aligned} & \int \frac{a_0^{(i)}}{2} T_0 dx + \int a_0 T_1 dx + \sum_{m=2}^{\infty} a_m^{(i)} \int T_m dx + K_2 \\ & \frac{a_0^{(i)}}{2} T_1 + \frac{a_1^{(i)}}{2} T_2 + K_3 + \sum_{m=2}^{\infty} a^{(i)} \frac{T_{m+1}}{m+1} + \sum_{m=2}^{\infty} a_m^{(i)} \frac{T_{m-1}}{m-1} + K_2. \end{aligned}$$

Expandindo as séries e agrupando, vamos ter

$$\frac{1}{2}(a_0^{(i)} - a_2^{(i)})T_1 + \frac{1}{2}(a_1^{(i)} - a_3^{(i)})\frac{T_2}{2} + \frac{1}{2}(a_2^{(i)} - a_4^{(i)})\frac{T_3}{3} + \cdots + K.$$

Assim vamos ter em (4.40)

$$\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{a_{m-1}^{(i)} - a_{m+1}^{(i)}}{m} T_m + K = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{(i-1)} T_m + K_1$$

tendo que $K_1 = \frac{1}{2}(K_3 + K_2)$. Logo concluimos que para $m \geq 1$

$$a_{m-1}^{(i)} - a_{m+1}^{(i)} = 2ma_m^{(i-1)}$$

□

4.2.2 Truncamento da Série de Chebyshev

Conforme [54] vamos definir o operador P_m sobre a função $f(x)$ que é continuamente diferenciável pelo seu truncamento com m termos

$$P_m f(x) = \sum_{n=0}^m u_n a_n T_n(x). \quad (4.41)$$

Conseqüentemente,

$$(I - P_m)f(x) = \sum_{n=m+1}^{\infty} u_n a_n T_n(x), \quad (4.42)$$

onde I denota o operador identidade. Fazendo,

$$\begin{aligned} [(I - P_m)f(x)]^2 &= \left(\sum_{n=m+1}^{\infty} u_n a_n T_n(x) \right)^2 \leq \left(\sum_{n=m+1}^{\infty} |a_n| \right)^2 \\ [(I - P_m)f(x)]^2 &\leq \left(\sum_{n=m+1}^{\infty} |a_n| \right)^2 = \left[\sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{|a'_{n-1} - a'_{n+1}|}{2n} \right]^2 \end{aligned}$$

$$\leq \frac{1}{4} \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sum_{n=m+1}^{\infty} (a'_{n-1} - a'_{n+1})^2 \leq \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sum_{n=m}^{\infty} a_n'^2.$$

Logo,

$$[(I - P_m)f(x)]^2 \leq \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sum_{n=m}^{\infty} \|a'_n\|^2.$$

Da identidade Parseval, para $P_{-1} = 0$, segue

$$\sum_{n=m}^{\infty} \|a'_n\|^2 = \|(I - P_{m-1})f'(x)\|_q^2 \leq \|f'\|_q^2,$$

Então

$$\|(I - P_m)f\|_n \leq \sigma(m) \|(I - P_{m-1})f'(x)\|_q^2 \leq \|f'\|_q^2 \quad (4.43)$$

onde

$$\sigma(m) = \sqrt{\sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{1}{n^2}}$$

em que

$$\frac{1}{m+1} \leq \sigma(m)^2 \leq \int_m^{\infty} \frac{du}{u^2} = \frac{1}{m}.$$

Novamente aplicando a identidade Parseval em $(I - P_m)f(x)$,

$$\|(I - P_m)f(x)\|_q^2 = \left\| \sum_{n=m+1}^{\infty} a_n T_n(x) \right\|_q^2 = \sum_{n=m+1}^{\infty} \|a_n\|^2 = \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{\|a'_{n-1} - a'_{n+1}\|^2}{4n^2}.$$

Assim sendo

$$\|(I - P_m)f(x)\|_q^2 \leq \frac{1}{4(m+1)^2} \sum_{n=m+1}^{\infty} \|a'_{n-1} - a'_{n+1}\|^2 \leq \frac{1}{4(m+1)^2} \sum_{n=m+1}^{\infty} (\|a'_{n-1}\|^2 + \|a'_{n+1}\|^2).$$

Logo tem-se que

$$\|(I - P_m)f(x)\|_q^2 \leq \frac{1}{(m+1)^2} \sum_{n=m}^{\infty} \|a'_n\|^2.$$

Portanto, para $m = 0, 1, 2, \dots$ e $P_{-1} \equiv 0$

$$\|(I - P_m)f(x)\|_q \leq \sigma_1(m) \|(I - P_{m-1})f'(x)\|_q \leq \sigma_1(m) \|f'(x)\|_q \quad (4.44)$$

e

$$\sigma_1(m) = \frac{1}{m+1}.$$

Repetindo a estimativa (4.43), vamos ter

$$\|(I - P_m)f(x)\|_n \leq \sigma(m)\|(I - P_{m-1})f'(x)\|_q \leq \sigma(m)\sigma_1(m-1)\|(I - P_{m-1})f''(x)\|_q \quad (4.45)$$

e

$$\|(I - P_m)f(x)\|_q \leq \frac{\sigma(m)}{m(m-1)}\|f'''(x)\|_q \leq \frac{1}{(m+1)m(m-1)}\|f'''(x)\|_q. \quad (4.46)$$

Seja $f(x)$ uma função continuamente diferenciável em $[-1, 1]$ e seja

$$P_m f(x) = f_m(x) \quad (4.47)$$

assim,

$$f'(x) - f'_m(x) = \frac{df}{dx} - \frac{df_m}{dx}.$$

De (4.41) vamos ter

$$f'(x) - f'_m(x) = \frac{d}{dx}[(I - P_m)f(x)] = \sum_{n=m+1}^{\infty} u_n a'_n T_n(x).$$

Se

$$f'(x) - f'_m(x) \sim \varphi_m(x) + (I - P_{m+1})f'(x) \quad (4.48)$$

então,

$$|\varphi_m(x)| \leq |a'_{m+1}| \leq \left(|a'_{m+1}| \frac{m+2}{2} + |a'_m| \frac{m+1}{2} \right).$$

Como

$$\frac{m+1}{2} < \frac{m+2}{2}$$

então

$$|\varphi_m(x)| \leq \frac{m+2}{2} (|a'_m| + |a'_{m+1}|).$$

Em seguida, elevando ao quadrado ambos os lados e somando os resultados de todos os componentes, temos

$$|\varphi_m(x)|^2 \leq (m+2)^2(\|a'_m\|^2 + \|a'_{m+1}\|^2) \leq (m+2)^2\|(I - P_{m-1})f'\|_q^2,$$

segue então,

$$\|\varphi_m\|_n \leq (m+2)\|(I - P_{m-1})f'\|_q. \quad (4.49)$$

Temos ainda que

$$\|\varphi_m\|_q^2 \leq \|a_{m+1}\|^2 \leq \|a'_{m+1}\|^2 \frac{m+2}{2} + \|a'_m\|^2 \frac{m+1}{2}$$

assim,

$$\|\varphi_m\|_q^2 \leq \frac{m+2}{2}(\|a'_{m+1}\|^2 + \|a'_m\|^2) \leq \frac{m+2}{2}\|(I - P_{m-1})f'\|_q^2$$

ou seja

$$\|\varphi_m\|_q \leq \sqrt{\frac{m+2}{2}}\|(I - P_{m-1})f'\|_q. \quad (4.50)$$

Em

$$f'(x) - f'_m(x) = \varphi_m(t) + (I - P_{m+1})f'(t)$$

por (4.44) e (4.49) vamos ter

$$\|f' - f'_m\|_n \leq (m+2)\|(I - P_{m-1})f'\|_q + \|(I - P_{m+1})f'\|_n. \quad (4.51)$$

Para $\|f' - f'_m\|_q$, aplicamos a identidade Parseval, então temos

$$\|f' - f'_m\|_q^2 = \|\varphi_m\|_q^2 + \|(I - P_{m+1})f'\|_q^2 \leq (\|\varphi_m\|_q + \|(I - P_{m+1})f'\|_q)^2.$$

De (4.50), temos

$$\|f' - f'_m\|_q \leq \sqrt{\frac{m+2}{2}}\|(I - P_{m-1})f'\|_q + \|(I - P_{m+1})f'\|_q$$

Quando $f(x)$ for duas vezes continuamente diferenciável no intervalo $[-1, 1]$, aplicando (4.43) e (4.44) em (4.49) e (4.51), temos

$$\|f' - f'_m\|_n \leq \left[\frac{m+2}{m} \sigma(m+1) \right] \|f''\|_q \quad (4.52)$$

$$\|f' - f'_m\|_q \leq \left[\frac{\sqrt{m+2}}{\sqrt{2}m} + \frac{1}{m+2} \right] \|f''\|_q. \quad (4.53)$$

Segue como conseqüência que $f'_m(x) \rightarrow f'(x)$ ao $m \rightarrow \infty$.

5 MÉTODOS PARA A RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE VALOR DE CONTORNO EM SÉRIES DE CHEBYSHEV

Em 1938, Lanczos introduz o uso dos polinômios de Chebyshev na interpolação de dados e obtenção de aproximações para soluções de equações diferenciais ordinárias (EDOs) [38],[37]. Em 1957, Clenshaw sugere calcular diretamente os coeficientes da solução de uma EDO e suas derivadas utilizando propriedades especiais dos polinômios de Chebyshev. Posteriormente, Urabe [54] desenvolveu uma teoria de um método prático para calcular soluções de problemas com valores de contorno num ou dois pontos em séries de Chebyshev. Estes métodos podem ser utilizados na obtenção de uma aproximação da solução $d(x)$ da EDO (3.16) com os coeficientes (3.19).

Antes de aplicarmos a série em polinômios de Chebyshev no problema, vamos fazer uma mudança de variável tal que ocorra uma bijeção entre os intervalos $[0, L]$ e $[-1, 1]$. Assim sejam $x \in [0, L]$ e $z \in [-1, 1]$, portanto

$$z = \left(\frac{2}{L}\right)x - 1 \quad e \quad x = \frac{L}{2}(z + 1).$$

5.1 O Método de Clenshaw

Considera-se a equação diferencial

$$\sum_{i=0}^4 b_{8-2i}(\lambda) d^{(2i)}(x) = 0, \tag{5.1}$$

Escreve-se a solução e suas derivadas em série de Chebyshev

$$d(x) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k a_k T_k(z), \quad (5.2)$$

$$(5.3)$$

Substituindo na EDO, resulta

$$\sum_{k=0}^{\infty} u_k \left(\sum_{i=0}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i)} \right) T_k(z) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Então,

$$\sum_{i=0}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i)} = \begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k^{(8)} \\ a_k^{(6)} \\ a_k^{(4)} \\ a_k^{(2)} \\ a_k \end{pmatrix} = 0 \quad (5.4)$$

Por conveniência, denota-se o membro à esquerda por $\Theta(k)$. Para determinar os coeficientes das derivadas em termos dos coeficientes da solução, é utilizada a propriedade das séries com polinômios de Chebyshev

$$a_{k-1}^{(i)} - a_{k+1}^{(i)} = 2k a_k^{(i-1)}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (5.5)$$

Substituindo k por $k - 1$ e depois por $k + 1$ em (5.4) e efetuando a subtração entre as duas equações, resulta

$$\begin{aligned} \Theta(k-1) - \Theta(k+1) &= \sum_{i=0}^4 b_{8-2i}(\lambda) \left(a_{k-1}^{(2i)} - a_{k+1}^{(2i)} \right) = 0 \\ &= \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) 2k a_k^{(2i-1)} + b_8 (a_{k-1} - a_{k+1}) = 0. \end{aligned}$$

Dividindo por $2k$, segue

$$\frac{\Theta(k-1) - \Theta(k+1)}{2k} = \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i-1)} + b_8 \frac{a_{k-1} - a_{k+1}}{2k} = 0. \quad (5.6)$$

Introduzindo o operador em diferenças

$$\Gamma u_k = \frac{u_{k-1} - u_{k+1}}{2k} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2k} & 0 & -\frac{1}{2k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k-1} \\ u_k \\ u_{k+1} \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

a relação anterior escreve-se

$$\Gamma \Theta(k) = \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i-1)} + b_8 \Gamma a_k = 0.$$

Repetindo o mesmo procedimento com (5.6), resulta

$$\begin{aligned} \frac{\Theta(k-2)}{2(k-1)} - \frac{k\Theta(k)}{(k-1)(k+1)} + \frac{\Theta(k+2)}{2(k+1)} &= \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) 2k a_k^{(2i-2)} \\ &+ b_8 \frac{a_{k-2}}{2(k-1)} - \frac{ka_k}{(k-1)(k+1)} + \frac{a_{k+2}}{2(k+1)} = 0. \end{aligned}$$

Dividindo por $2k$, vem

$$\begin{aligned} \frac{\Theta(k-2)}{4k(k-1)} - \frac{k\Theta(k)}{2k(k-1)(k+1)} + \frac{\Theta(k+2)}{4k(k+1)} &= \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i-2)} \\ &+ b_8 \frac{a_{k-2}}{4k(k-1)} - \frac{ka_k}{2k(k-1)(k+1)} + \frac{a_{k+2}}{4k(k+1)} = 0. \end{aligned}$$

Assim,

$$\Gamma^2 \Theta(k) = \sum_{i=1}^4 b_{8-2i}(\lambda) a_k^{(2i-2)} + b_8 \Gamma^2 a_k = 0.$$

Matricialmente, os dois passos anteriores podem ser escritos de maneira compacta como segue.

$$\begin{aligned}
0 &= \begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} a_k^{(7)} \\ a_k^{(5)} \\ a_k^{(3)} \\ a_k^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a_{k-1} - a_{k+1} \end{pmatrix} \right] \\
&= \begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} a_k^{(7)} \\ a_k^{(5)} \\ a_k^{(3)} \\ a_k^{(1)} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Gamma a_k \end{pmatrix} \right],
\end{aligned} \tag{5.8}$$

e para segundo passo

$$0 = \begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} a_k^{(6)} \\ a_k^{(4)} \\ a_k^{(2)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ a_k \\ \Gamma^2 a_k \end{pmatrix} \right] \tag{5.9}$$

onde

$$\Gamma^2 u_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{4k(k-1)} & 0 & \frac{-1}{2(k-1)(k+1)} & 0 & \frac{1}{4k(k+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k-2} \\ u_{k-1} \\ u_k \\ u_{k+1} \\ u_{k+2} \end{pmatrix}. \tag{5.10}$$

Como a equação diferencial é de ordem par, após oito iterações, será obtida uma equação em diferenças. Para a_k

$$\Gamma^8 \Theta(k) = \sum_{i=0}^4 b_{8-2i} \Gamma^{2i} a_k = \begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ \Gamma^2 a_k \\ \Gamma^4 a_k \\ \Gamma^6 a_k \\ \Gamma^8 a_k \end{pmatrix} = 0. \quad (5.11)$$

Esta equação resulta da forma

$$\begin{pmatrix} b_0 & b_2 & b_4 & b_6 & b_8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & w_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_{24} & w_{25} & w_{26} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_{33} & w_{34} & w_{35} & w_{36} & w_{37} & 0 & 0 \\ 0 & w_{42} & w_{43} & w_{44} & w_{45} & w_{46} & w_{47} & w_{48} & 0 \\ w_{51} & w_{52} & w_{53} & w_{54} & w_{55} & w_{56} & w_{57} & w_{58} & w_{59} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k-8} \\ a_{k-6} \\ a_{k-4} \\ a_{k-2} \\ a_k \\ a_{k+2} \\ a_{k+4} \\ a_{k+6} \\ a_{k+8} \end{pmatrix} = 0. \quad (5.12)$$

onde

$$\begin{aligned}
w_{15} &= 1, w_{24} = \frac{1}{4(k-1)k}, w_{25} = \frac{-1}{2(k^2-1)}, w_{26} = \frac{1}{4(k+1)k}, \\
w_{37} &= \frac{1}{16k(k+2)(k+3)(k+1)}, w_{24} = \frac{1}{4(k-1)k} \\
w_{35} &= \frac{3}{8(k^2-4)(k^2-1)}, w_{36} = \frac{-1}{4k(k^2+2k-3)(k+1)} \\
w_{33} &= \frac{1}{16k(k-2)(k-3)(k-1)}, w_{34} = \frac{-1}{4k(k-3)(k^2-1)} \\
w_{48} &= \frac{1}{64k(k+5)(k+3)(k+2)(k+4)(k+1)} \\
w_{47} &= \frac{-3}{32k(k+5)(k^2+2k-3)(k+2)(k+1)} \\
w_{46} &= \frac{15}{64k(k^2+2k-3)(k-2)(k+4)(k+1)} \\
w_{45} &= \frac{-5}{16(k-3)(k^2+2k-3)(k+1)(k^2-4)} \\
w_{44} &= \frac{15}{64k(k-3)(k+2)(k-4)(k^2-1)} \\
w_{43} &= \frac{-3}{32k(k-3)(k-2)(k-5)(k^2-1)} \\
w_{42} &= \frac{1}{64k(k-5)(k-3)(k-4)(k-2)(k-1)} \\
w_{59} &= \frac{1}{256k(k+5)(k+2)(k+7)(k+3)(k+4)(k+6)(k+1)} \\
w_{58} &= \frac{-1}{32k(k+2)(k^2+6k-7)(k+3)(k+4)(k+5)(k+1)} \\
w_{57} &= \frac{7}{64k(k+2)(k+3)(k^2+4k-12)(k+5)(k^2-1)} \\
w_{55} &= \frac{35}{128(k^2-16)(k^2-4)(k^2-1)(k^2-9)} \\
w_{56} &= \frac{-7}{32k(k+3)(k+4)(k-2)(k^2+2k-15)(k^2-1)} \\
w_{54} &= \frac{-7}{32k(k-5)(k-4)(k+2)(k^2-1)(k^2-9)} \\
w_{53} &= \frac{7}{64k(k-5)(k-6)(k-3)(k^2-4)(k^2-1)} \\
w_{52} &= \frac{1}{32k(k-5)(k-4)(k-2)(k-7)(k-3)(k^2-1)} \\
w_{51} &= \frac{1}{256k(k-5)(k-7)(k-6)(k-3)(k-2)(k-4)(k-1)}.
\end{aligned}$$

Segue,

$$S_0 a_{k-8} + S_2 a_{k-6} + S_4 a_{k-4} + S_6 a_{k-2} + S_8 a_k + S_{10} a_{k+2} + S_{12} a_{k+4} + S_{14} a_{k+6} + S_{16} a_{k+8} = 0$$

Fazendo a mudança de variável, $k - 8 = j$, resulta uma equação em diferenças de ordem 16 com índices pares:

$$\sum_{j=0}^8 S_{2j}(j) a_{k+2j-8} = 0 \quad (5.13)$$

onde

$$S_{2j} = \begin{cases} \sum_{i=1}^{j+1} w_{6-i,j+1} b_{10-2i}, & \text{se } 0 \leq j \leq 4; \\ \sum_{i=1}^{9-j} w_{6-i,j+1} b_{10-2i}, & \text{se } 5 \leq j \leq 8. \end{cases}$$

Para resolver (5.13), são requeridas 16 condições iniciais. Uma maneira consiste em truncar a série de Chebyshev para $k = 15$ em $x = 0$ ($z = -1$), e utilizar a equação em diferenças

$$b_0(\lambda) d_{j+8} + b_2(\lambda) d_{j+6} + b_4(\lambda) d_{j+4} + b_6(\lambda) d_{j+2} + b_8(\lambda) d_j = 0 \quad (5.14)$$

$$d_0 = d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = d_5 = d_6 = 0 \quad (5.15)$$

$$b_0(\lambda) d_7 = 1 \quad (5.16)$$

para obter os valores

$$d_j = d^{(j)}(0) = \sum_{k=0}^{15} u_k a_k T_k^{(j)}(-1)$$

para $j = 8 : 15$. Resulta a equação matricial

$$T \mathbf{a} = \mathbf{q} \quad (5.17)$$

$$\begin{pmatrix} T_0(-1) & T_1(-1) & \cdots & T_{15}(-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ T_0^{(vii)}(-1) & T_1^{(vii)}(-1) & \cdots & T_{15}^{(vii)}(-1) \\ T_0^{(viii)}(-1) & T_1^{(viii)}(-1) & \cdots & T_{15}^{(viii)}(-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ T_0^{(xv)}(-1) & T_1^{(xv)}(-1) & \cdots & T_{15}^{(xv)}(-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{15} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ d_7 \\ d_8 \\ \vdots \\ d_{16} \end{pmatrix}, \quad (5.18)$$

ou seja, $T\mathbf{a} = \mathbf{q}$, em que a matriz T de ordem 16×16 consiste das derivadas dos polinômios de Chebyshev em $x = 0$, o vetor x é de ordem 16×1 e q é um vetor de ordem 16×1 .

5.2 O Método de Urabe

Urabe tem considerado o problema com ν valores no intervalo $[-1, 1]$

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= X(x(t), t), \\ \sum_{i=0}^{\nu} L_i x(t_i) &= l. \end{aligned} \quad (5.19)$$

onde x e $X(x, t)$ são vetores, L_i ($i = 0, 1, 2, \dots, \nu$) são matrizes, l é um vetor, e

$$-1 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{\nu-1} < t_\nu = 1.$$

Para $\nu = 0$, tem-se o problema de valor inicial:

$$Lx(-1) = l \quad (5.20)$$

e para $\nu = 1$ um problema de contorno em dois pontos. Em particular, nos extremos do intervalo

$$L_0x(-1) + L_1x(1) = l. \quad (5.21)$$

O caso de pontos intermediários tem sido discutido por Sansone [47] que é de interesse em vigas segmentadas [53]. Neste trabalho, é focado no caso do problema de valor inicial.

Para obter uma aproximação da solução do problema (5.19), considere-se uma série finita de Chebyshev [27]

$$x_m(t) = \sum_{n=0}^m u_n a_n T_n(t) \quad (5.22)$$

onde para cada n , $(0, 1, 2, \dots, m)$

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi x_m(\cos(\theta)) \cos(n\theta) d\theta \quad (5.23)$$

são coeficientes a serem determinados. Aqui u_n denota o coeficiente (4.28), isto é

$$u_n = \begin{cases} 0, & n < 0; \\ \frac{1}{2}, & n = 0; \\ 1, & n > 0. \end{cases}$$

Substituindo na EDO (5.19), e descartando termos de ordem superior a $m - 1$, resulta

$$\frac{dx_m(t)}{dt} = P_{m-1}X(x(t), t) \quad (5.24)$$

$$\sum_{i=0}^{\nu} L_i x_m(t_i) = l \quad (5.25)$$

onde P_{m-1} é um operador linear que expressa o truncamento da Série de Chebyshev rejeitando os termos de ordem superior a $m - 1$. Seja,

$$\frac{dx_m}{dt} = \sum_{n=0}^m u_n a'_n T_n(t). \quad (5.26)$$

Da relação (4.36) para os coeficientes da derivadas

$$a'_n = \sum_{s=0}^m u_{s-n} v_{s-n} s a_s, \quad (5.27)$$

resulta a equivalência

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\pi X[x_m(\cos(\theta), \cos(\theta))] \cos(n\theta) d\theta - a'_n = 0, \quad n = 1 : m - 1 \quad (5.28)$$

$$(5.29)$$

$$\sum_{i=0}^{\nu} L_i x_m(t_i) - l = 0.$$

A série finita de Chebyshev $x_m(t)$ que satisfaz o problema (5.24) será chamada de aproximação em série de Chebyshev de ordem, m para o problema (5.19). O fato que aproximações em série de Chebyshev de alta ordem usualmente fornecem boas aproximações para a solução exata e tem sido mostrado por Urabe [54] através do seguinte teorema:

Teorema 5.1. (Urabe) *No problema (5.19), supõem-se que $X(x, t)$ é uma função continuamente diferenciável com respeito a x e t em uma região Ω do tx -espaço interceptado por dois hiperplanos $t = -1$ e $t = 1$. Se o problema (5.19) possui uma solução isolada $x = \hat{x}(t)$ tal que*

$$U = \{(t, x) \mid \|x - \hat{x}(t)\| \leq \delta_0, t \in [-1, 1]\} \subset \Omega$$

para algum δ_0 positivo, então para um m_0 suficientemente grande, existe uma aproximação de Chebyshev $x = \bar{x}(t)$ de qualquer ordem $m > m_0$ tal que

$$\begin{aligned}\bar{x}_m(t) &\rightarrow \hat{x}(t) \\ \frac{d\bar{x}_m(t)}{dt} &\rightarrow \frac{d\hat{x}(t)}{dt}\end{aligned}$$

uniformemente quando $t \rightarrow \infty$.

Por uma solução isolada, entende-se que a solução $x = x(t)$ é tal que a matriz $G = \sum_{i=0}^{\nu} L_i \Phi(t_i)$ é não singular e $\Phi(t)$ é uma matriz fundamental da primeira variação da equação diferencial de (5.19) com respeito a $x = x(t)$ satisfazendo a condição inicial $\Phi(-1) = I$ (I é a matriz identidade).

Para determinar os coeficientes da série finita de Chebyshev através de uma relação de recorrência, é suficiente resolver numericamente uma equação determinante da forma (5.28). Por conveniência, o método de Urabe será considerado com a equação de segunda ordem

$$x'' = Q(t)x + R(t)x' \quad (5.30)$$

$$x(-1) = \alpha \quad (5.31)$$

$$x'(-1) = \beta. \quad (5.32)$$

Primeiro, a equação é transformada num sistema de equações de primeira ordem,

$$x' = y \quad (5.33)$$

$$y' = Q(t)x + R(t)y. \quad (5.34)$$

Segundo, os coeficientes são escritos em séries de Chebyshev

$$Q(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n Q_n T_n(x) \quad (5.35)$$

$$R(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n R_n T_n(x) \quad (5.36)$$

e procura-se uma solução aproximada

$$x_m(t) = \sum_{n=0}^m u_n a_n T_n(t) \quad (5.37)$$

$$y_m(t) = \sum_{n=0}^m u_n b_n T_n(t) \quad (5.38)$$

com

$$Q(t)x_m(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n q_n T_n(t) \quad (5.39)$$

$$R(t)y_m(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n r_n T_n(t). \quad (5.40)$$

Proposição 5.1. *Para $n = 0, 1, 2, \dots$, resulta*

$$Q(t)x_m(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n q_n T_n(t) \quad (5.41)$$

$$(5.42)$$

$$R(t)x_m(t) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n r_n T_n(t) \quad (5.43)$$

onde

$$q_n = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m (u_{n-s} u_s Q_{n-s} + u_{n+s} u_s Q_{n+s} + u_n s - n u_s Q_{s-n}) \quad (5.44)$$

$$r_n = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m (u_{n-s} u_s R_{n-s} + u_{n+s} u_s R_{n+s} + u_n s - n u_s R_{s-n}). \quad (5.45)$$

Demonstração

Substituindo a série finita e utilizando a propriedade do produto de polinômios de Chebyshev [41]

$$2T_m(x)T_n(x) = T_{m+n}(x) + T_{|m-n|}(x) \quad (5.46)$$

resulta

$$\begin{aligned} Q(t)x_m(t) &= \sum_{s=0}^m \sum_{r=0}^{\infty} u_s u_r Q_r a_s T_r(t) T_s(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m \sum_{r=0}^{\infty} u_s u_r Q_r a_s (T_{r+s}(t) + T_{|r-s|}(t)) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{s=0}^m u_{n-s} u_s Q_{n-s} a_s \right) T_n(t) + \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m u_s^2 Q_s a_s T_0(t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{s=0}^m u_{n+s} u_s Q_{n+s} a_s \right) T_n(t) + \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m u_{s-n}^2 Q_{s-n} a_s T_0(t) \end{aligned}$$

onde é assumido $Q_r = 0$ para $r < 0$. Assim,

$$\begin{aligned} q_0 &= u_0^2 Q_0 a_0 + \sum_{s=0}^m u_s^2 Q_s a_s = \sum_{s=0}^m u_s Q_s a_s \\ q_n &= \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m (u_{n-s} u_s Q_{n-s} + u_{n+s} u_s Q_{n+s} + u_n s - n u_s Q_{s-n}), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

A prova para R é análoga e será omitida.

□

Utilizando (5.27) nas equações determinantes (5.28) com auxílio da proposição (5.44) e as aproximações em séries finitas de Chebyshev para $x(t), y(t)$

resulta

$$a'_n = b_n, \quad n = 0 : m - 1 \quad (5.47)$$

$$b'_n = q_n + r_n, \quad n = 0 : m - 1 \quad (5.48)$$

$$\sum_{n=0}^m (-1)^n u_n a_n = \alpha \quad (5.49)$$

$$\sum_{n=0}^m (-1)^n u_n b_n = \beta \quad (5.50)$$

onde

$$a'_n = \sum_{s=0}^m u_{s-n} v_{s-n} s a_s,$$

$$b'_n = \sum_{s=0}^m u_{s-n} v_{s-n} b_s$$

para $n = 0 : m - 1$, e

$$q_n = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m (u_{n-s} u_s Q_{n-s} + u_{n+s} u_s Q_{n+s} + u_{s-n} u_s Q_{s-n} + u_{-n} u_{-s} Q_s) a_s \quad (5.51)$$

$$r_n = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^m (u_{n-s} u_s R_{n-s} + u_{n+s} u_s R_{n+s} + u_{s-n} u_s R_{s-n} + u_{-n} u_{-s} R_s) b_s \quad (5.52)$$

da mesma forma para $n = 0, 1, 2, \dots, m - 1$.

Sendo

$$a'_{n-1} - a'_{n+1} = 2n a_n, \quad n = 1, 2, \dots, m$$

com $a'_m = a'_{m+1} = 0$, resulta das identidades anteriores

$$a_n = \frac{1}{2n} (b_{n-1} - d_n b_{n+1}) \quad (5.53)$$

onde

$$d_n = \begin{cases} 1, & n \leq m - 2; \\ 0, & n \leq m - 1. \end{cases} \quad (5.54)$$

$$b_{m+1} = 0.$$

Substituindo a_n na terceira relação de (5.47), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^m (-1)^n \frac{1}{2n} (b_{n-1} - d_n b_{n+1}) &= \alpha \\ a_0 = b_0 - \frac{1}{2}b_1 + 2 \sum_{n=2}^m \frac{(-1)^{s-1}}{(s-1)(s+1)} b_s + 2\alpha. \end{aligned}$$

Com o valor obtido de a_0 e de a_n em termos de b_n , substituindo em (5.51), segue

$$\begin{aligned} q_n = Q_n \alpha + \left[\frac{1}{2}Q_n + \frac{1}{4}(u_{n-1}Q_{n-1} + Q_{n+1} + u_{1-n}Q_{1-n}) \right] b_0 \\ + \left[-\frac{1}{4}Q_n + \frac{1}{8}(u_{n-2}Q_{n-2} + Q_{n+2} + u_{2-n}Q_{2-n}) \right] b_1 + \sum_{s=2}^{m-1} \left[\frac{(-1)^{s-1}}{(s-1)(s+1)} Q_n \right. \\ \left. + \frac{1}{4(s+1)}(u_{n-s-1}Q_{n-s-1} + Q_{n+s+1} + u_{s+1-n}Q_{s+1-n}) \right. \\ \left. + \frac{1}{4(s-1)}(u_{n-s+1}Q_{n-s+1} + Q_{n+s-1} + u_{s-1-n}Q_{s-1-n}) \right] b_s. \end{aligned}$$

Substituindo os resultados obtidos na segunda relação de (5.47), tem-se para $n = 0, 1, 2, \dots, m-1$, que

$$\sum_{s=0}^m H_{ns} b_s = K_n \quad (5.55)$$

onde

$$\begin{aligned} H_{n0} &= \frac{1}{2}Q_n + \frac{1}{2}R_n + \frac{1}{4}(u_{n-1}Q_{n-1} + Q_{n+1} + u_{1-n}Q_{1-n}) \\ H_{n1} &= -\frac{1}{4}Q_n + \frac{1}{8}(u_{n-2}Q_{n-2} + Q_{n+2} + u_{2-n}Q_{2-n}) + \\ &\quad \frac{1}{2}(u_{n-1}n - 1 + R_{n+1} + u_{1-n}R_{1-n}) - u_{1-n}v_{1-n}. \end{aligned}$$

Para $s = 2, 3, \dots, m - 1$, tem-se

$$\begin{aligned}
 H_{ns} &= \frac{(-1)^{s-1}}{(s-1)(s+1)} Q_n + \frac{1}{4(s+1)} (u_{n-s-1} Q_{n-s-1} + Q_{n+s+1} + u_{s+1-n} Q_{s+1-n}) \\
 &\quad + \frac{1}{4(s-1)} (u_{n-s+1} Q_{n-s+1} + Q_{n+s-1} + u_{s-1-n} Q_{s-1-n}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (u_{n-s} R_{n-s} + R_{n+s} + u_{s-n} R_{s-n}) - u_{s-n} v_{s-n} s
 \end{aligned}$$

$$H_{nm} = \frac{1}{2} (R_{n+m} + R_{m-n}) - v_{m-n} m$$

$$K_n = -Q_n \alpha.$$

Finalmente, para $n = m$, resulta

$$\sum_{ms} H_{ms} b_s = K_m$$

onde

$$H_{m0} = \frac{1}{2}, \quad H_{ms} = (-1)^s, \quad s = 1 : m \quad (5.56)$$

$$K_m = \beta. \quad (5.57)$$

Resumindo, tem-se sistemas de $(m + 1)$ equações algébricas lineares

$$\sum_{s=0}^m H_{ns} b_s = K_n, \quad n = 0 : m \quad (5.58)$$

em $(m + 1)$ incógnitas b_s , $s = 0 : m$ e as equações

$$a_0 = b_0 - \frac{1}{2}b_1 + 2 \sum_{n=2}^m \frac{(-1)^{s-1}}{(s-1)(s+1)} b_s + 2\alpha \quad (5.59)$$

$$a_n = \frac{1}{2n}(b_{n-1} - d_n b_{n+1}), \quad (5.60)$$

$$n = 1 : m.$$

5.2.1 A solução $d(x)$ através do método de Urabe

Para obter uma solução aproximada do problema de valor inicial

$$b_0 d^{(viii)}(x) + b_2 d^{(vi)}(x) + b_4 d^{(iv)}(x) + b_6 d''(x) + b_8 d(x) = 0 \quad (5.61)$$

$$d(0) = d'(0) = d''(0) = \dots = d^{(vi)}(0) = 0, \quad b_0 d^{(vii)}(0) = 1, \quad (5.62)$$

pelo método de Urabe, a EDO é reduzida para o sistema de equações de primeira ordem:

$$\left\{ \begin{array}{l} d'(x) = m(x) \\ m'(x) = p(x) \\ p'(x) = q(x) \\ q'(x) = r(x) \\ r'(x) = s(x) \\ s'(x) = t(x) \\ t'(x) = v(x) \\ v'(x) = -\frac{1}{b_0}[b_2 t(x) + b_4 r(x) + b_6 p(x) + b_8 d(x)]. \end{array} \right. \quad (5.63)$$

Com as aproximações

$$\begin{aligned}
 d_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n a_n T_n(z) \\
 m_k(x) &= \frac{2}{L} \sum_{n=0}^k u_n b_n T_n(z) \\
 p_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n c_n T_n(z) \\
 q_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n D_n T_n(z) \\
 r_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n e_n T_n(z) \\
 s_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n f_n T_n(z) \\
 t_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n g_n T_n(z) \\
 v_k(x) &= \sum_{n=0}^k u_n h_n T_n(z)
 \end{aligned} \tag{5.64}$$

resulta

$$\left\{ \begin{array}{l}
 a'_n = b_n \\
 b'_n = c_n \\
 c'_n = D_n \\
 D'_n = e_n \\
 e'_n = f_n \\
 f'_n = g_n \\
 g'_n = h_n \\
 h'_n = -\frac{1}{b_0} [b_2 g_n + b_4 e_n + b_6 c_n + b_8 a_n].
 \end{array} \right. \tag{5.65}$$

Das condições iniciais, vem

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^k (-1)^n u_n a_n &= 0, & \sum_{n=0}^k (-1)^n u_n b_n &= 0 \\
\sum_{n=0}^k (-1)^n u_n c_n &= 0, & \sum_{n=0}^k (-1)^n u_n D_n &= 0 \\
\sum_{n=0}^k (-1)^n u_n e_n &= 0, & \sum_{n=0}^k (-1)^n u_n f_n &= 0 \\
\sum_{n=0}^k (-1)^n u_n g_n &= 0, & \sum_{n=0}^k (-1)^n u_n h_n &= \frac{1}{b_0}.
\end{aligned}
\tag{5.66}$$

Pela relação (5.53), resulta

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{1}{2n}(b_{n-1} - b_{n+1}), & b_n &= \frac{1}{2n}(c_{n-1} - c_{n+1}) \\
c_n &= \frac{1}{2n}(D_{n-1} - D_{n+1}), & D_n &= \frac{1}{2n}(e_{n-1} - e_{n+1}) \\
e_n &= \frac{1}{2n}(f_{n-1} - f_{n+1}), & f_n &= \frac{1}{2n}(g_{n-1} - g_{n+1}) \\
&& g_n &= \frac{1}{2n}(h_{n-1} - h_{n+1})
\end{aligned}
\tag{5.67}$$

para $n = 1, 2, \dots, m$. Assim para $n = 0$, pelas condições iniciais do problema (5.61), segue

$$\begin{aligned}
a_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n a_n, & b_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n b_n \\
c_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n c_n, & D_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n D_n \\
e_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n e_n, & f_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n f_n \\
g_0 &= 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n g_n, & h_0 &= 2 \frac{1}{b_0} + 2 \sum_{n=1}^k (-1)^{n+1} u_n h_n.
\end{aligned}$$

De maneira recursiva, resulta de (5.67) que

$$\begin{aligned} g_n &= \Gamma h_n \\ e_n &= \Gamma^3 h_n \\ c_n &= \Gamma^5 h_n \\ a_n &= \Gamma^7 h_n. \end{aligned} \tag{5.68}$$

Assim para $n \geq 7$ vamos ter

$$h'_n = -\frac{1}{b_0} [b_2 \Gamma h_n + b_4 \Gamma^3 h_n + b_6 \Gamma^5 + b_8 \Gamma^7].$$

Fazendo uma substituição de variável, $s = n-7$, conforme o método de Urabe, vamos procurar obter um sistema de equações algébricas lineares, onde $w = 1, 2, \dots, k$

$$\sum_{s=0}^m H_{ws} h_s = K_w. \tag{5.69}$$

Conforme a Proposição 4.14, para cada $w = 1, 2, \dots, k-1$, tem-se

$$\sum_{s=0}^k u_{s-n} v_{s-n} s h_s = -\frac{1}{b_0} [b_2 \Gamma h_n + b_4 \Gamma^3 h_n + b_6 \Gamma^5 + b_8 \Gamma^7]. \tag{5.70}$$

assim, para $w = k$ temos

$$\sum_{s=0}^k H_{ks} h_s = d^{(vii)}(0) \tag{5.71}$$

onde

$$H_{k0} = \frac{1}{2}$$

e

$$H_{ks} = (-1)^s.$$

O que completa o sistema em (5.69).

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho obteve-se um modelo para o estudo de vibrações em nanotubos de carbono duplos. O modelo foi formulado com o uso das equações de uma viga de Timoshenko e acoplado pela ação da força de van der Waals entre as paredes dos nanotubos duplos. O sistema resultante foi escrito como uma equação diferencial matricial de segunda ordem em que os coeficientes são matrizes que envolvem dependência espacial do modelo.

A formulação matricial do modelo permitiu realizar uma análise modal de maneira compacta para variadas condições de contorno. Os modos de vibração foram caracterizados como solução de uma equação diferencial de segunda ordem na variável espacial com coeficientes matriciais de ordem 4 e dependentes da frequência de vibração. O problema de autovalor quadrático foi abordado com o uso de uma base matricial gerada por uma solução matricial fundamental ou função de Green, $h(x)$ de ordem 4×4 , resultando um sistema algébrico de dimensão 8. No caso bi-apoiado, ao considerar os modos como sendo funções trigonométricas com amplitudes vetoriais, o sistema foi reduzido para dimensão 4, obtendo em conformidade com [66], as frequências naturais.

A determinação de $h(x)$ conforme Claeysen, [13], envolve o uso das derivadas da solução $d(x)$ de um problema de valor inicial de oitava ordem, devido a dimensão das matrizes. A equação diferencial linear resultante possui coeficientes que dependem da frequência de maneira não linear.

Para determinar esta solução, foram propostos os métodos de Clenshaw e Urabe com o uso dos polinômios de Chebyshev. Consideramos que o método de Urabe apresenta uma maior simplicidade, visto que o método depende apenas da formulação e resolução de um sistema de equações algébricas lineares. Pois, o método de Clenshaw, aplicado na obtenção de $d(x)$, requer o suprimento de dados iniciais

adicionais aos fornecidos no problema inicial que define $d(x)$, e que são necessários para iterar uma equação em diferenças com coeficientes variáveis. Além disso, o método de Urabe apresenta estimativas para as aproximações das derivadas de $d(x)$ das quais depende $h(x)$.

Diante do crescente interesse em nanotecnologia, trabalhos que estudem as propriedades dos nanomateriais serão cada vez mais freqüentes. Para trabalhos futuros, podemos abordar o estudo de outros modelos bem como aprofundar métodos envolvendo a série de Chebyshev e os métodos da colocação e diferenças finitas.

Referências Bibliográficas

- [1] AIFANTIS, E., YAN, Y., Vibrations of Double-Walled Carbon Nanotubes with Different Boundary Conditions Between Inner and Outer tubes, *Journal of Applied Mechanics*, 75, 021013/1-021013/9, 2008
- [2] AYDOGGDU, M., ECE, M., Vibration and Buckling of In-Plane Loaded Double-Walled Carbon Nano-Tubes, *Turkish J. Eng. Env. Sci.*, 31, 305-310, 2007.
- [3] BATRA, R. C., SEARS, A. Continuum models of multi-walled carbon nanotubes, *Int. Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 7577-7596, 2007.
- [4] BOYD, J. P., *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*, Dover Publications, New York, 2000
- [5] BEIN, M., *Métodos Espectrais: Fundamentos e Exemplos*. Maste's thesis, UFRGS\PPGMAp, Porto Alegre, 1995
- [6] CLAEYSSSEN J., ET AL, Eigenanalysis of multi-walled carbon nanotubes by using the impulse response, *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*, John Wiley, 2008.
- [7] CLAEYSSSEN J., On prediction the response of non-conservative linear vibrating systems by using dynamical matrix solutions, *Journal of Sound and Vibrations*, 140(1), 1990, pp. 73-84.
- [8] CLAEYSSSEN, J. R., CANAHUALPA, G. AND JUNG, C. A direct approach to second-order matrix non-classical vibrating equations, *Applied Numerical Mathematics*, 30(1), 1999, pp.65-78.
- [9] CLAEYSSSEN, J. R., COPETTI, R. D., TSUKAZAN, T., Free vibrations in Euler-Bernoulli multi-span with interaction forces in carbon nanotubes

- continuum modeling, *proceedings de 6th Brazilian Conference on Dynamics, control and their applications*, 2007.
- [10] CLAEYSSSEN, J. R., FERREIRA, F. I., *A Resposta Impulso em Modelos Evolutivos e Estacionários*, Editora UFSM, Santa Maria, 2009.
- [11] CLAEYSSSEN, J. R., GALLICCHIO, E., TAMAGNA, A., *Sistemas Vibratórios Amortecidos*, UFRGS Editora, Porto Alegre, 2004.
- [12] CLAEYSSSEN, J. R., COPETTI, R. D., TSUKAZAN, T., Matrix vibration formulation of damped multi-span beams, *Proceedings of IMECE2006 - ASME - International Mechanical Engineering Congress and Exposition - 05-10 November, Chicago, Illinois, 2006*.
- [13] CLAEYSSSEN, J. R., TSUKAZAN, T. Dynamical Solutions of Linear Matrix Differential Equations, *Quarterly of Applied Mathematics*, XLVIII(1), 1990.
- [14] CLENSHAW, C. W., The Numerical Solution of Linear Differential Equations in Chebyshev Series, *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 53, 134-149, 1956.
- [15] COPETTI, R. D., CLAEYSSSEN, J. R., TSUKAZAN, T., Modal formulation of segmented Euler-Bernoulli beams, *Mathematics Problems in Engineering*, 2008.
- [16] COPETTI, R. D., CLAEYSSSEN, J. R., TSUKAZAN, T., A non-local model for multiwalled carbon nanotube in elastic mediums, *Proceedings of Dicon 2009, Brazillian Conference in Dynamics, Control and their Applications, São José do Rio Preto, São Paulo, 2009*.
- [17] COLLINS, P. G., AVOURIS, P. Nanotubes for electronics, *Scientific American*, Vol. 283(6), pp.67-69, 2000.
- [18] COURANT R., Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations, *Bull. Amer. Math. Soc.*, 49 (1943) 1-23.

- [19] COURANT, R., JOHN, F., *Introduction to Calculus and Analysis Vol.1*, Springer, 1999
- [20] DAVIS, P. *Interpolation and Approximation*, Blaisdell, 1963.
- [21] DE ROSA, M. A., Free vibrations of stepped beams with elastic ends, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 173(4), pp. 563-567, 1994.
- [22] DE ROSA, M. A., BELLES, P. M., MAURIZI, M. J., Free vibrations of stepped beams with intermediate elastic supports, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 181(3), pp. 905-910, 1995.
- [23] ERINGEN, A. C., On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, *Journal of Applied Physics*, Vol. 54, 4703, 1983.
- [24] GIBSON, R. F., AYORINDE, E. O., WEN, Y. F. Vibrations of carbon nanotubes and their composites: A review, *Composites Science and Technology*, Vol. 67, N 1, pp. 1-28, 2007.
- [25] GINSBERG, J., *Mechanical and Structural Vibrations*, John Wiley & Sons, 2002.
- [26] GORMAN, D. *Free Vibration Analysis of Beams and Shafts*, John Wiley, New York, 1975.
- [27] GOTTLIEB, D., ORZAG, S., *Numerical Analysis of Spectral Methods*, SIAM, 1977
- [28] HAN, S. M., BENAROYA, H., WEI, T., Dynamics of transversely vibrating beams using four engineering theories, *Journal of Sound and vibration* (1999) 225(5), pp. 935-988
- [29] HORNER, T., MORRIS, A., Chebyshev Polynomials in the Numerical Solution of Differential Equations, *Mathematics of Computation*, 31, 881-891, 1977.

- [30] HORNAYAK, G. L., DUTTA, J., TIBBALS, H., RAO, A. K., Introduction to Nanoscience, CRC, Boca Raton, 2008
- [31] IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature*, Vol. 354, pp. 1-8, 1991.
- [32] JANG, S. K., BERT, C. W., Free vibrations of stepped beams: Exact and numerical solutions, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 130(2), pp. 342-346, 1989.
- [33] KALAMKAROV, A. L., GEORGIADES, A. V., ROKKAM, S. K., VEEDU, P. V., GHASEMI-NEJHAD, M. N. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties, *Int. J. Solids and structures*, Vol. 43, pp. 6832-6854, 2006.
- [34] KELSALL, R., HAMLEY, I., GEOGHEGAN, M. Nanoscale Science and Technology, John Wiley, 2005
- [35] KORENEV, B. G., *L. M. Reznikov, Dynamic Vibration Absorbers*, John Wiley & Sons, 1993.
- [36] KRYLOV, A. N., Collected works, Vol. 10, Ship Vibration, Moscow, Leningrad, ANSSSR, 1948.
- [37] LANCZOS, C., *Applied Analysis*, Sir Isaac Pitman & Sons, LTD, London, 1957.
- [38] LANCZOS, C., Trigonometric Interpolation of Empirical and Analytical Functions, *Journal of Mathematics and Physics*, Vol.17, pp 123-199, 1938
- [39] LEIPHOLZ, H., *Stability of Elastic Systems*, Sitthoff & Noordoff, Netherlands, 1980.
- [40] LOW, K. H., On the method to derive frequency equations of beams carrying multiple masses, *Int. Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 43, pp. 871-881, 2001.

- [41] LUKE, Y., *The Special Functions and Their Approximations*, Academic Press Vol.1, pp.298, 1969.
- [42] MEIROVITCH, L., *Elements of Vibration Analysis*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1986.
- [43] PEDDIESON, J., BUCHANAN, G. R., MCNITT, R. P., Application of non-local continuum model to nanotechnology, *Int. J. of Engineering Science*, Vol. 41, pp. 305-312, 2003.
- [44] PIN LU , LEE, H. P., ZHANG, Q. P. Application of nonlocal beam models for carbon nanotubes, *Int. Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 5289-5300, 2007.
- [45] RAO, S., *Mechanical Vibrations*, Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1990.
- [46] REYES, R. J. R., *Um Modelo não linear de Timoshenko para uma viga elástica com força axial*, PhD thesis, UFRGS\PPGMAp, Porto Alegre 2009.
- [47] SANSONE, G., *Equazioni Differenziali nel Campo Reale*, Ed. Zanicheli, 1963.
- [48] SUDAK, L. J., Column buckling of multiwalled carbon nanotubes using nonlocal continuum mechanics, *Journal of Applied Physics*, Vol. 94, Number 11, pp. 7281-7287, 2003.
- [49] THOSTENSON, E. T., REN, Z., CHOU, T. W. Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review, *Composites Science and Tecnology*, Vol. 61, pp.1899-1912, 2001.
- [50] TOLSTOV, G. *Fourier Series*, Dover, 1976

- [51] TREACY, M. M., EBBESEN, T. W., GIBSON, J. M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes, *Nature* Vol. 381, pp. 678-680, 1996
- [52] TURHAN, Ö., On the eigencharacteristics of longitudinally vibrating rods with a cross-section discontinuity, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 248(1), pp. 167-177, 2001.
- [53] TSUKAZAN, T., The Use of a Dynamical Basis for Computing the Modes of a Beam System with a Discontinuous Cross-Section, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 281, pp. 1175-1185, 2005.
- [54] URABE, M., Numerical Solution of Multi-Point Boundary Value Problems in Chebyshev Series Theory of the Method. *Numerische Mathematik*, 9, 341-366, 1967
- [55] URABE, M., Numerical Solution of Boundary Value Problems in Chebyshev Series - A Method of Computation and Error Estimation. *Lectures Notes in Mathematics: Conference on the Numerical Solution of Differential Equations*, 109, 40-86, 1969
- [56] UŚCIŁOWSKA, A., KOŁODZIEJ, J. A., Free vibrations of immersed column carrying a tip Mass, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 216(1), pp. 147-157, 1998.
- [57] VU, H. V., ORDOÑEZ, A. M., KARNOPP, B. H., Vibration of a double beam system, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 229(4), pp. 807-822, 2000.
- [58] WANG, Q., Effect of the van der Waals interaction on analysis of double-walled carbon nanotubes, *The 2nd International Conference on Structural Stability and Dynamics*, 2005.

- [59] WANG, Q., Varadan, V. K., Vibration of carbon nanotubes studied using nonlocal continuum mechanics, *Smart Mater. Struct.*, 15, pp. 659-666, 2006.
- [60] WANG, Q., Wave propagation in carbon nanotubes via nonlocal continuum mechanics, *Journal of Applied Physics*, Vol. 98, 124301, 2005.
- [61] WANG, Q., TING HU, CHEN, G., JIANG, Q. Bending instability characteristics of double-walled carbon nanotubes, *Physical Review B*, Vol. 71, 045403, 2005.
- [62] WANG, Q., ZHOU, G. Y., LIN, K. C., Scale effect on wave propagation of double-walled carbon nanotubes, *Int. Journal of Solids and Structures*, Vol. 43, pp. 6071-6084, 2006.
- [63] WRIGHT, K., Chebyshev Collocation Methods dor Ordinary Differential Equation, *The Computer Journal*, Vol. 6, n°4, pp. 358-365, 1964.
- [64] YOON, J., RU, C. Q., MIUDUCHOWSKI, A. Noncoaxial resonance of an isolated multiwall carbon nanotube, *Physical Review B*, Vol. 66, 233-402, 2002.
- [65] YOON, J., RU, C. Q., MIUDUCHOWSKI, A. Vibration of an embedded multiwall carbon nanotube, *Composites Science and Technology*, Vol. 63, pp. 1533-1542, 2003.
- [66] YOON, J., MIODUCHOWSKI, C., Terahertz Vibration of Short Carbon Nanotubes Modelled as Timoshenko Beams, *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 72, 10-17, 2005.
- [67] YU, M. F., LOUIE, O., DYER, M. J., MOLONI, K., RUOFF, R. S., Strenght and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load, *Science* Vol. 287, pp. 637-640, 2000

- [68] ZHANG, Y. Q., LIU, G. R., XIE, X. Y., Free transverse vibrations of double-walled carbon nanotubes using a theory of nonlocal elasticity, *Physical Review B*, VoL. 71, 195404, 2005.