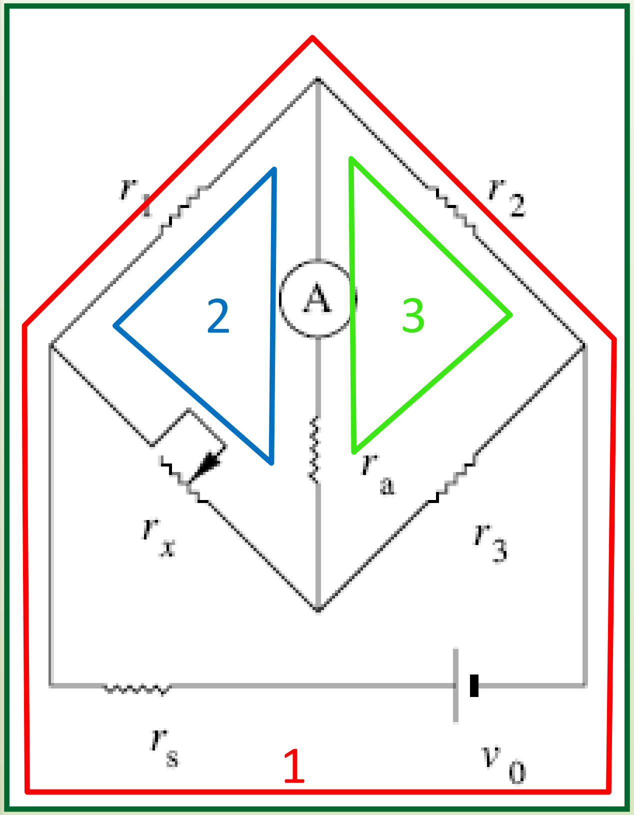
MÉTODOS NUMÉRICOS PARA MATRIZES

FÍSICA COMPUTACIONAL

Muitos problemas em física podem ser formulados em forma de matrizes.

Ex: Ponte de Wheatstone não compensada



Aplicando as leis de Kirchhoff

1. $r_s i_0 + r_1 i_1 + r_2 i_2 = v_0$
2. $r_x(i_1 - i_0) + r_1 i_1 + r_a(i_1 - i_2) = 0$
3. $r_2 i_2 + r_3(i_2 - i_0) + r_a(i_2 - i_1) = 0$

arranjando

1. $r_s i_0 + r_1 i_1 + r_2 i_2 = v_0$
2. $-r_x i_0 + (r_1 + r_x + r_a) i_1 - r_a i_2 = 0$
3. $-r_3 i_0 - r_a i_1 + (r_2 + r_3 + r_a) i_2 = 0$

FÍSICA COMPUTACIONAL

As equações anteriores podem ser escritas em forma matricial: $v = iR$

onde:

$$R = \begin{pmatrix} r_s & r_1 & r_2 \\ -r_x & r_1 + r_x + r_a & -r_a \\ -r_3 & -r_a & r_2 + r_3 + r_a \end{pmatrix} \qquad i = \begin{pmatrix} i_0 \\ i_1 \\ i_2 \end{pmatrix} \qquad v = \begin{pmatrix} v_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Se multiplicarmos ambos os lados da equação pela matriz inversa de R (R^{-1}):

$i = R^{-1}v$ Resolve o sistema de eqs. para i

Mais para frente veremos que não é absolutamente necessário conhecer a inversa da matriz para resolver o sistema de equações lineares.

FÍSICA COMPUTACIONAL

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

Uma matriz A de dimensões n x m é definida por seus elementos A_{ij}, onde o índice das linhas é i = 1,2,3.....n, e o das colunas é j = 1,2,3....m.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nm} \end{pmatrix}$$

Se n = m $\rightarrow$ matriz quadrada

Estudadas neste tópico

Um sistema de equações lineares pode ser escrito na forma:

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j = b_i \qquad \text{com} \quad i = 1, 2 \ldots n$$

Sendo x_j as variáveis a resolver, A_{ij} e b_i $\rightarrow$ coeficientes dados.

FÍSICA COMPUTACIONAL

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

Ou: $Ax = b$

O número de colunas de A tem que ser o mesmo que o número de linhas de x, do contrário, o produto não existe.

A **inversa** de uma matriz quadrada A (A^{-1}) é definida por:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I$$

Onde I é a matriz unidade com elementos $I_{ij} = \delta_{ij}$

FÍSICA COMPUTACIONAL

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

O **determinante** de uma matriz quadrada A – n x n (|A|) é definido como:

$$|A| = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j} A_{ij} |R_{ij}| \quad \text{com } i = 1, 2 \ldots n$$

$|R_{ij}|$ é o determinante da matriz residual de A sem sua iª linha nem a jª coluna.

A combinação:

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} |R_{ij}| \quad \rightarrow \textbf{ Um co-fator } \text{de A}$$

O determinante de uma matriz 1 x 1 é o próprio elemento

FÍSICA COMPUTACIONAL

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

O **traço** de uma matriz A é a soma de todos seus elementos diagonais.

$$TrA = \sum_{i=1}^{n} A_{ii}$$

A **transposta** de uma matriz A (**A^T**) têm elementos com os índices das linhas e colunas de A trocados, ou seja:

$$A^T_{ij} = A_{ji}$$

É chamada de **operação hermitiana** de A (**$A^\dagger$**) ao complexo conjugado de A^T

$$A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}$$

Pode-se chamar A, de **matriz hermitiana** se $A^\dagger = A$

Pode-se chamar A, de **matriz unitária** se $A^\dagger = A^{-1}$

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

Pode-se chamar A de **matriz ortogonal** se: $A^T = A^{-1}$

Algumas propriedades de matrizes ortogonais:

- A^{-1} é também ortogonal
- $|A|$ é 1 ou -1
- Os vetores das colunas (linhas) são ortonormais*
- Se A e B são ortogonais $\rightarrow AB$ é também ortogonal

*vetores ortonormais $\begin{cases} \text{ortogonais (produto escalar = 0)} \\ \text{unitários (comprimento = 1)} \end{cases}$

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

Uma matriz é chamada de **triangular** superior (triangular inferior) se todos os elementos abaixo (acima) da diagonal são zero

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ 0 & A_{22} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & A_{nn} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ A_{n1} & \dots & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

triangular superior — triangular inferior

O determinante de uma matriz triangular é o produto de seus elementos diagonais

Se uma matriz tem inversa ou determinante diferente de zero é chamada de **matriz não singular**, em outro caso, chama-se de **matriz singular**

OPERAÇÕES COM MATRIZES E CONCEITOS BÁSICOS

A adição de uma linha (coluna) multiplicada por um fator λ a outra linha (coluna) preserva o determinante da matriz.

$A'_{ij} = A_{ij} + \lambda A_{kj}$ j = 1,2 ...n $\Rightarrow$ |A'| = |A|

Exemplo:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

$$|A| = 2(25 - 24) - 3(20 - 18) + 1(16 - 15)$$

$$|A| = 2 - 6 + 1 = -3$$

Multiplicando a 2ª linha por 2 e somando à 1ª

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 13 & 13 \\ 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

$$|A| = 10(25 - 24) - 13(20 - 18) + 13(16 - 15)$$

$$|A| = 10 - 26 + 13 = -3$$

A troca de duas linhas (ou colunas) de A, somente faz que o |A| mude de sinal.

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

Em um sistema de equações lineares, como por exemplo:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3 \end{aligned} \quad \Rightarrow AX=B \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

A troca de uma equação por outra (troca de linhas) não vai afetar a solução

A troca de uma equação por uma combinação linear delas também não afeta a solução. Ex:

$$\begin{aligned} &(a_{11} + 3a_{21})\, x_1 + (a_{12} + 3a_{22})\, x_2 + (a_{13} + 3a_{23})\, x_3 = (b_1 + 3b_2) \\ &5a_{21}x_1 + 5a_{22}x_2 + 5a_{23}x_3 = 5b_2 \qquad \Rightarrow \qquad A'X=B' \\ &(a_{31} - a_{11})\, x_1 + (a_{32} - a_{12})\, x_2 + (a_{33} - a_{13})\, x_3 = b_3 - b_1 \end{aligned}$$

Tem a mesma solução

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

Um dos métodos mais utilizados para resolver um sistema de equações lineares é o método da eliminação gaussiana

⇓

Sequência de combinações lineares com A $\rightarrow$ A' triangular superior o inferior

$$\begin{aligned} a'_{11}x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 &= b'_1 \\ a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 &= b'_2 \\ a'_{33}x_3 &= b'_3 \end{aligned}$$

Com o sistema agora na forma triangular é muito fácil achar as soluções:

$$x_3 = \frac{b'_3}{a'_{33}}$$

Substituindo x_3 na segunda equação calcula-se x_2 e assim sucessivamente

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

Vejamos como converter uma matriz A em uma matriz A’ que tenha a forma triangular superior.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Multiplicando a 1ª linha por $-a_{21}/a_{11}$ e somando à 2ª linha se tem:

$$A'^{1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \cancelto{0}{a_{21} - a_{11}\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right)} & a_{22} - a_{12}\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right) & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad B'^{1} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 - b_1\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right) \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

Na sequência deve-se multiplicar a 1ª linha por $-a_{31}/a_{11}$ e somar à 3ª linha

$$A'^2 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} - a_{12}\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right) & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{32} - a_{12}\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}\right) & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad B'^2 = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 - b_1\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right) \\ b_3 - b_1\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}\right) \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

E assim sucessivamente até que todos os elementos da primeira coluna, abaixo de a_{11}, sejam zero.

Depois se passa à segunda coluna, sempre considerando os elementos a serem zerados, aqueles que estão abaixo da diagonal da matriz.

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

De forma geral se queremos zerar $a_{ij} \rightarrow$ (linha j) * $(-a_{ij}/a_{jj})$ + linha i

Lembrar de realizar esse procedimento também com a matriz B.

Vejamos um exemplo:

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 15$$
$$-3x_1 + x_2 + 5x_3 = -10$$
$$2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 15 \\ -10 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Inicialmente queremos zerar $a_{21} \rightarrow$ 1ª linha*$(-a_{21}/\ a_{11})$ e somar à 2ª linha

(1 2 3 15)

$(-a_{21}/\ a_{11}) = 3$ * 1ª linha = 3 6 9 45

(-3 1 5 -10)

Somando à 2ª linha:

$$A'^{1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad B'^{1} = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ 5 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

$$A'^{1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad B'^{1} = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Agora devemos zerar a_{31} $\rightarrow$ 1ª linha*($-a_{31}/ a_{11}$) e somar à 3ª linha

(1 2 3 15)

($-a_{31}/ a_{11}$) = -2 * 1ª linha = -2 -4 -6 -30

(2 3 -1 5)

Somando à 3ª linha:

$$A'^{2} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad B'^{2} = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ -25 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

$$A'^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad B'^2 = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ -25 \end{pmatrix}$$

Agora devemos zerar a_{32} $\rightarrow$ 2ª linha*($-a_{32}/ a_{22}$) e somar à 3ª linha

(0 7 14 35)

($-a_{32}/ a_{22}$) = 1/7 * 2ª linha = 0 1 2 5

(0 -1 -7 -25)

Somando à 3ª linha:

$$A'^3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \qquad B'^3 = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ -20 \end{pmatrix}$$

Matriz triangular superior

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Eliminação gaussiana

$$A'^{3} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \qquad B'^{3} = \begin{pmatrix} 15 \\ 35 \\ -20 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 15 \\ -3x_1 + x_2 + 5x_3 &= -10 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 &= 5 \end{aligned} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 15 \\ 7x_2 + 14x_3 &= 35 \\ -5x_3 &= -20 \end{aligned}$$

Facilmente se obtêm as soluções: $x_3 = 4$; $x_2 = -3$; $x_1 = 9$

De forma geral, uma vez obtida a matriz triangular superior A’, as soluções x_i podem ser obtidas:

$$x_i = \frac{1}{a'_{ii}} \left(b'_i - \sum_{j=i+1}^{n} a'_{ij} x_j \right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Pivotar

Pode ocorrer que em algum passo, o elemento diagonal que se utiliza como denominador seja zero. Esse elemento é chamado de pivô.

Trocar duas das equações do sistema, ou seja, trocando 2 linhas da matriz.

Quais? A linha do pivô é aquela cujo elemento na mesma coluna do pivô tenha o maior valor absoluto:

Ex:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 4 \\ 5 & -2 & 3 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad A = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 3 \\ 3 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Matrizes triangulares – Determinante

O determinante de uma matriz triangular é o produto dos elementos diagonais, logo, após transformada a matriz A em uma matriz triangular A’ o determinante pode ser calculado facilmente.

Ex:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad A' = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \qquad |A| = |A'| = -35$$

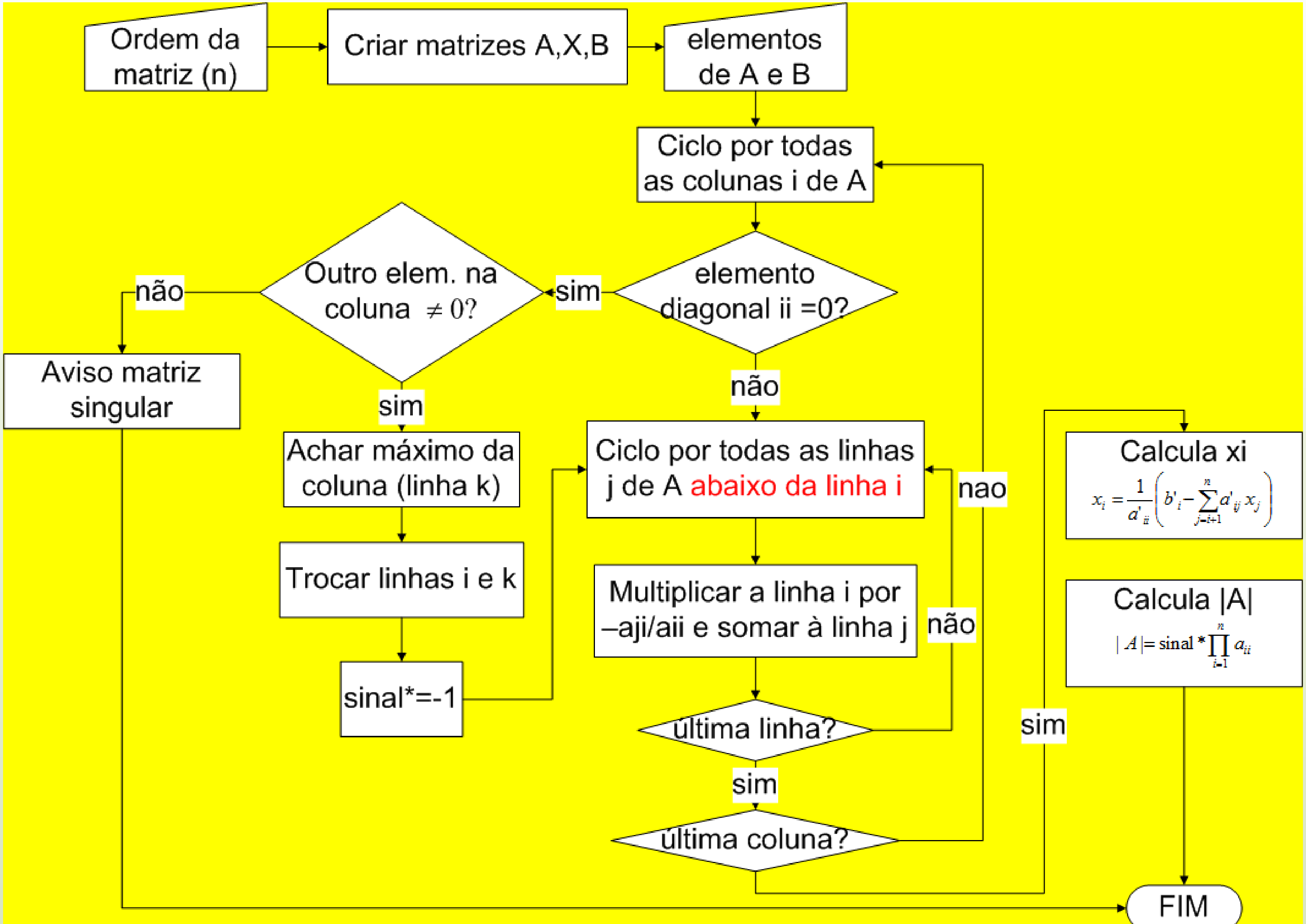
Quando se trocam duas linhas de uma matriz, o determinante muda de sinal, logo deve ser levado em consideração no caso de pivotar.

Ex:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 4 \\ 5 & -2 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow A_1 = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 3 \\ 3 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow A_1' = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 3 \\ 0 & \frac{16}{5} & \frac{11}{5} \\ 0 & 0 & \frac{5}{16} \end{pmatrix} \Rightarrow |A| = -5$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta



FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Matriz Inversa

Outra forma de resolvermos um sistema de equações lineares é achando a matriz inversa da matriz A

$AX = B$ se conhecemos $A^{-1} \rightarrow$ $X = A^{-1}B$

O método para calcular a matriz inversa é muito similar ao aplicado para converter a matriz A em uma matriz triangular.

O método que será aplicado a continuação é chamado de **Gauss-Jordan**

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

Aplicar uma sequência de operações lineares à matriz A de forma a que esta fique convertida na matriz unidade.

Se a mesma sequência de operações for aplicada à matriz unidade $\rightarrow$ teremos a matriz inversa de A.

Retomemos o exemplo anterior:

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 15 \\ -3x_1 + x_2 + 5x_3 &= -10 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_3 &= 5 \end{aligned} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 15 \\ -10 \\ 5 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

Temos que:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Inicialmente dividimos a linha i pelo elemento a_{ii} em A e em I. Ou seja, em nosso caso, dividimos a linha 1 por 1. Nada mudará.

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & 1 & 5 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad I^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Para zerar $a_{ij} \rightarrow$ (linha j) * $(-a_{ij})$ + (linha i)   em A e I

Devemos zerar a_{21} $\rightarrow$ (1ª linha)*$(-a_{21})$+ (2ª linha)

$-a_{21} = 3$ * 1ª linha =   3   6   9   3   0   0   Somando à 2ª linha:

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad I^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad I^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

zerar a_{31} $\rightarrow$ 1ª linha*(-a_{31}) + 3ª linha

-a_{31} = -2 * 1ª linha = -2 -4 -6 -2 0 0 Somando à 3ª linha:

$$A^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 7 & 14 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad I^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Passamos para a segunda coluna $\rightarrow$ Dividir 2ª linha/a_{22} (2ª linha/7)

$$A^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad I^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

$$A^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad I^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

zerar $a_{12} \rightarrow$ 2ª linha*($-a_{12}$) + 1ª linha

$-a_{12}$ = -2 * 2ª linha = 0 -2 -4 -6/7 -2/7 0 Somando à 1ª linha:

$$A^{(5)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -7 \end{pmatrix} \qquad I^{(5)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & -\frac{2}{7} & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

zerar $a_{32} \rightarrow$ 2ª linha*($-a_{32}$) + 3ª linha

$-a_{32}$ = 1 * 2ª linha = 0 1 2 3/7 1/7 0 Somando à 3ª linha:

$$A^{(6)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \qquad I^{(6)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & -\frac{2}{7} & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ -\frac{11}{7} & \frac{1}{7} & 1 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

$$A^{(6)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \qquad I^{(6)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & -\frac{2}{7} & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ -\frac{11}{7} & \frac{1}{7} & 1 \end{pmatrix}$$

Terceira coluna $\rightarrow$ Dividir 3ª linha/a_{33} (3ª linha/-5)

$$A^{(7)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad I^{(7)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & -\frac{2}{7} & 0 \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ \frac{11}{35} & -\frac{1}{35} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

zerar a_{13} $\rightarrow$ 3ª linha*(-a_{13}) + 1ª linha

-a_{13} = 1 * 3ª linha = 0 0 1 11/35 -1/35 -1/5 Somando à 1ª linha:

$$A^{(8)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad I^{(8)} = \begin{pmatrix} \frac{16}{35} & -\frac{11}{35} & -\frac{1}{5} \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ \frac{11}{35} & -\frac{1}{35} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

$$A^{(8)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad I^{(8)} = \begin{pmatrix} \frac{16}{35} & -\frac{11}{35} & -\frac{1}{5} \\ \frac{3}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ \frac{11}{35} & -\frac{1}{35} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

zerar a_{23} $\rightarrow$ 3ª linha*($-a_{23}$) + 2ª linha

$-a_{23}$ = -2 * 3ª linha = 0 0 -2 -22/35 2/35 2/5 Somando à 2ª linha:

$$A^{(9)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad I^{(9)} = \begin{pmatrix} \frac{16}{35} & -\frac{11}{35} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \\ \frac{11}{35} & -\frac{1}{35} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

A matriz A já foi convertida na matriz unidade, portanto, $I^{(9)} = A^{-1}$

FÍSICA COMPUTACIONAL

SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES – Gauss Jordan

Para calcular X, basta calcular: $A^{-1}B$

$$X = \begin{pmatrix} \frac{16}{35} & -\frac{11}{35} & -\frac{1}{5} \\ -\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \\ \frac{11}{35} & -\frac{1}{35} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 15 \\ -10 \\ 5 \end{pmatrix}$$

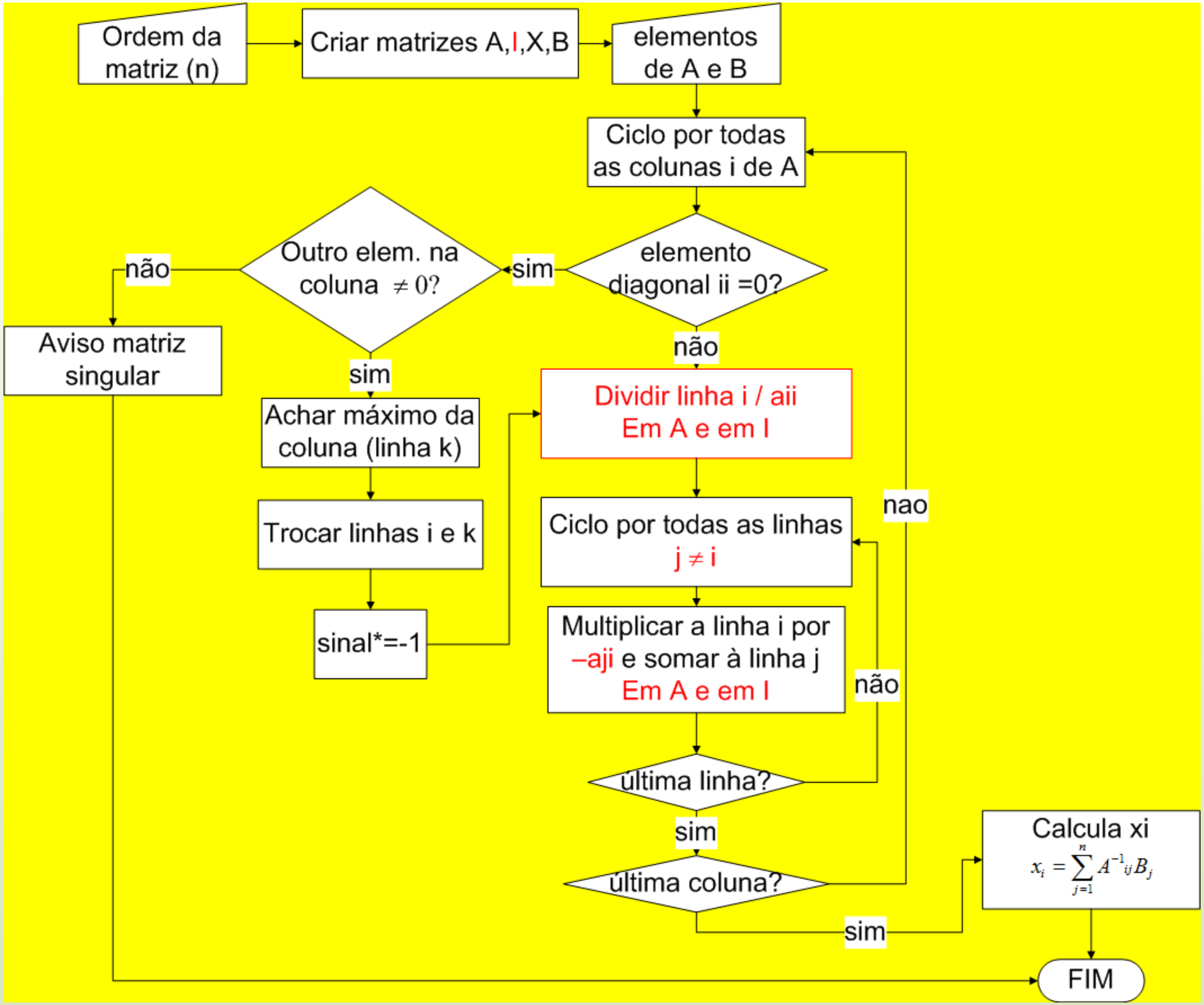
$$x_1 = \frac{16}{35}(15) + \left(-\frac{11}{35}(-10)\right) + \left(-\frac{1}{5}(5)\right) = \frac{48}{7} + \frac{22}{7} - 1 = 9$$

$$x_2 = -\frac{1}{5}(15) + \left(\frac{1}{5}(-10)\right) + \left(\frac{2}{5}(5)\right) = -3 - 2 + 2 = -3$$

$$x_3 = \frac{11}{35}(15) + \left(-\frac{1}{35}(-10)\right) + \left(-\frac{1}{5}(5)\right) = \frac{33}{7} + \frac{2}{7} - 1 = 4$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta



ZEROS DE FUNÇÕES DE VÁRIAS VARIÁVEIS

Até agora foi estudada a resolução numérica de sistemas de equações lineares

Agora vejamos como resolver problemas que não são de natureza linear, como por exemplo: a resolução de um sistema de equações não lineares de várias variáveis.

Vejamos como aplicar o método de Newton, agora para calcular os zeros de um sistema de equações de várias variáveis.

FÍSICA COMPUTACIONAL

ZEROS DE FUNÇÕES – Newton multi-variável

Assuma-se um sistema de equações de várias variáveis tal que:

$$F(X) = 0$$

onde:

$$F = (f_1, f_2, f_3 \dots f_n) \qquad X = (x_1, x_2, x_3 \dots x_n)$$

Se o sistema tem pelo menos uma solução em X = X_r pode-se efetuar uma expansão em série de Taylor ao redor desse ponto, tal que:

$$F(X) = F(X_r) + \Delta X \nabla F(X_r) + o\left(\Delta X^2\right) = 0 \qquad 1$$

onde: $\Delta X = X - X_r \Rightarrow X_r = X - \Delta X$

$$F(X_r) + \Delta X \nabla F(X_r) = 0$$

ZEROS DE FUNÇÕES – Newton multi-variável

A equação 1 pode ser reescrita como: $\nabla F(X_r)\Delta X = -F(X_r)$

Sistema de equações lineares$\rightarrow$ representadas em forma de matrizes:

$A\Delta X = B$ onde: $A_{ij} = \dfrac{\partial f_i(X_r)}{\partial x_j}$ $B_i = -f_i(X_r)$

Queremos encontrar a solução X_r

- Começar com um valor inicial (chute) para X_r (X_k).
- Calcular A_{ij} e B_i $\rightarrow$ Achar a solução (ΔX_k) do sistema linear acima.
- Aplicar o método de Newton para achar o próximo valor X_{k+1}.

$$X_{k+1} = X_k - \frac{g(X_k)}{g'(X_k)}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

$$X_{k+1} = X_k - \frac{g(X_k)}{g'(X_k)}$$

ZEROS DE FUNÇÕES – Newton multi-variável

$$g(X) = X_r - X_k$$

$$X_r = X - \Delta X$$

$$g(X) = X - \Delta X - X_k$$

$$g(X_k) = X_k - \Delta X_k - X_k \quad = -\Delta X_k$$

$$g'(X_k) = 1$$

$$\boxed{X_{k+1} = X_k + \Delta X_k}$$

lembrar que ΔX_k é a solução do sistema de equações lineares resolvido anteriormente com $X = X_k$

O método iterativo termina quando $dx = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} \Delta x_i^2}{n}} < tol$

FÍSICA COMPUTACIONAL

ZEROS DE FUNÇÕES – Secante multi-variável

Usar a formula de 2 pontos para aproximar as derivadas parciais:

$$A_{ij} = \frac{f_i(X + h_j) - f_i(X)}{h_j}$$

onde h_j é um intervalo finito ao longo da direção de x_j

Como regra: $h_j \approx hx_j$, sendo h uma aproximação grossa da raiz quadrada da tolerância do tipo de variável de ponto flutuante que esteja sendo utilizada no cálculo.

Ex: double (64 bits) $\rightarrow$ tolerância $\approx 2^{-63} \approx 1{,}1 \times 10^{-19} \rightarrow$ raiz $\approx 3{,}3 \times 10^{-10}$

ZEROS DE FUNÇÕES – Secante multi-variável

Exemplo: Calcular as soluções do seguinte sistema de equações:

$$f_1(x_1, x_2) = e^{x_1} \ln x_2^4 - x_1 = 0$$

$$f_2(x_1, x_2) = e^{x_2} \sin x_1 + x_2 = 0$$

Iniciaremos o cálculo considerando $X_0 = (x_1 , x_2)$ com $x_1 = x_2 = 5$

$$A \Delta X = B$$

$$B_1 = -f_1(5,5)$$

$$B_2 = -f_2(5,5)$$

$$A_{ij} = \frac{f_i(X + h_j) - f_i(X)}{h_j}$$

$$h = 4 \times 10^{-10}$$

$$A_{11} = \frac{f_1(x_1 + hx_1, x_2 + hx_1) - f_1(x_1, x_2)}{hx_1}$$

$$A_{12} = \frac{f_1(x_1 + hx_2, x_2 + hx_2) - f_1(x_1, x_2)}{hx_2}$$

$$A_{21} = \frac{f_2(x_1 + hx_1, x_2 + hx_1) - f_2(x_1, x_2)}{hx_1}$$

$$A_{22} = \frac{f_2(x_1 + hx_2, x_2 + hx_2) - f_2(x_1, x_2)}{hx_2}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

ZEROS DE FUNÇÕES – Secante multi-variável

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$$

Resolver sistema de equações para Δx_1 e Δx_2

Comprovar: $dx = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} \Delta x_i^2}{n}} < tol$

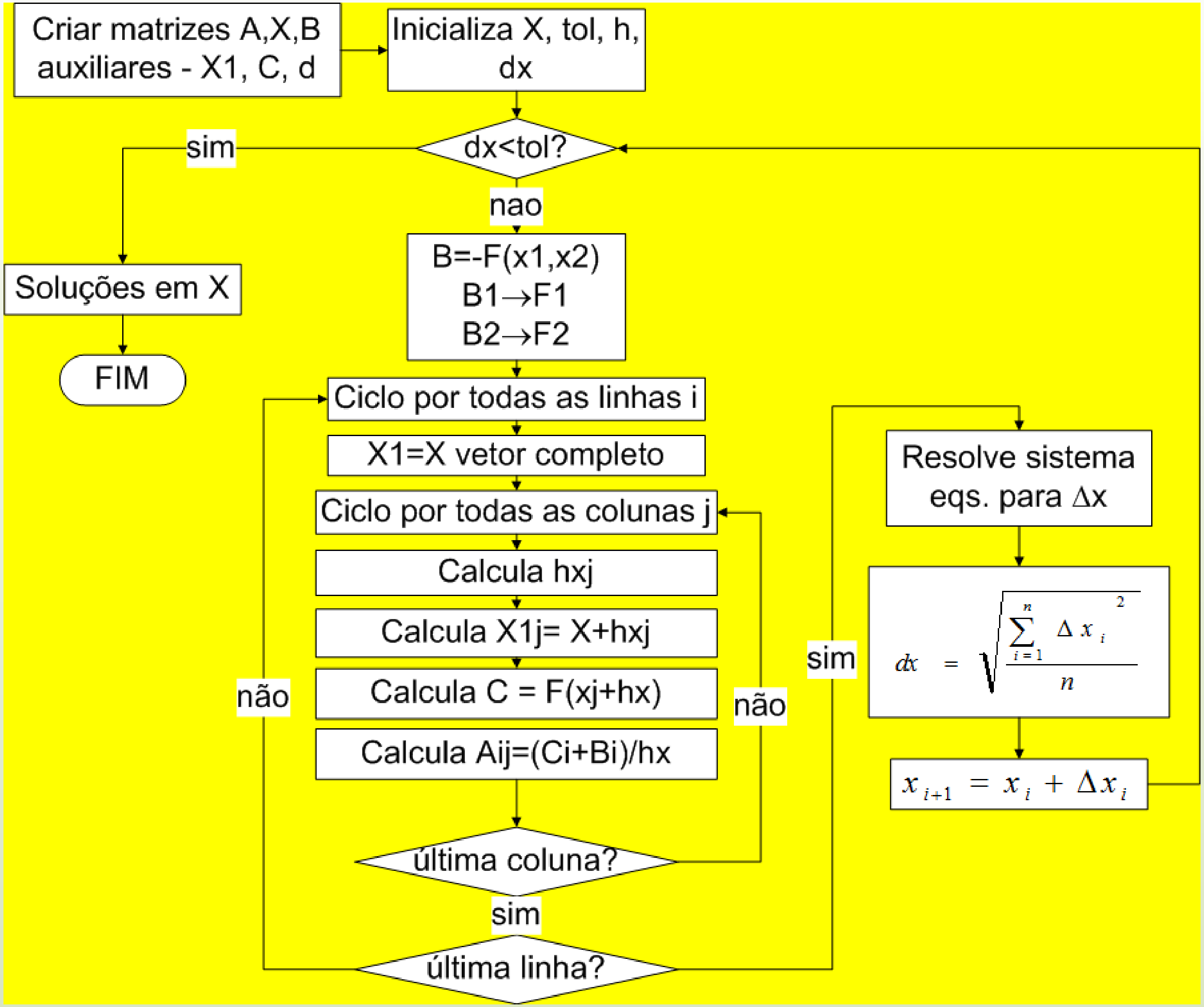
Se sim, x_1 e x_2 são as soluções do sistema de equações

Se não: $X_{k+1} = X_k + \Delta X_k$

O ciclo se repete

FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver pasta



FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Queremos realizar uma transformação A dentro de um espaço vetorial:

$A(x,y,z) \to (x+y-2z, x+y+z, 2x-y+2z)$ A → Operador linear

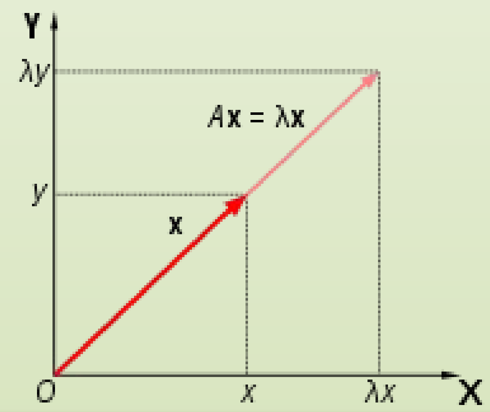
Em forma matricial

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x+y-2z \\ x+y+z \\ 2x-y+2z \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

λ(escalar) → autovalor de um operador linear A se existir um vetor X ≠ 0 tal que:

$AX = \lambda X$ nesse caso, X é chamado de autovetor de A

Geometricamente a equação acima implica que quando o operador A é aplicado a um autovetor, este experimenta apenas mudança na sua magnitude e/ou sinal, a direção fica inalterada.



FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Em Física $\rightarrow$ Para cada propriedade mensurável (observável) de um sistema físico há um operador correspondente.

Quando uma certa observável de um sistema físico é medida, o resultado é sempre é um dos autovalores do operador correspondente. O estado do sistema será então o autovetor.

Se os resultados das medidas são os autovalores das observáveis, deve-se exigir que elas tenham autovalores reais. Essa exigência nos assegura que ninguém vai medir, por exemplo, uma energia de (5+3i) J

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Na maioria dos problemas em física, as matrizes que representam as observáveis são hermitianas:

$A^\dagger = A$ $\quad$ $A^\dagger \rightarrow$ complexo conjugado de A^T

Por qué hermitianas?

- Todos os autovalores de uma matriz hemitiana são reais.
- Os autovetores podem ser ortonormalizados.
- Pode ser transformada em uma matriz tridiagonal* com o mesmo conjunto de autovalores

*matriz tridiagonal: Todos os elementos da matriz são zero exceto aqueles da diagonal e da vizinhança da diagonal.

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Objetivo $\rightarrow$ encontrar os autovalores e autovetores de matrizes hermitianas

O problema de autovalores de uma matriz hermitiana complexa $n \times n$ é equivalente ao de uma matriz real e simétrica de ordem $2n \times 2n$.

Suponhamos uma matriz complexa $\rightarrow$ Separar em partes real e imaginária

$$A = B + iC$$

Se A é hermitiana $\Rightarrow$

B é real e simétrica $B_{ij} = B_{ji}$

C é real e anti-simétrica $C_{ij} = -C_{ji}$

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Se separarmos o autovetor z também em parte real e imaginária $z = x + iy$, o problema de autovalores pode ser escrito:

$$Az = \lambda z \quad \Longleftrightarrow \quad (B + iC)(x + iy) = \lambda (x + iy)$$

Se A (3×3) $\rightarrow$ Quantos λ?

$$Bx + iBy + iCx - Cy = \lambda (x + iy)$$

$$Bx - Cy = \lambda x$$

$$Cx + By = \lambda y$$

$$\Downarrow$$

A’

$$\boxed{\begin{pmatrix} B & -C \\ C & B \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

A’ $\rightarrow$ Matriz simétrica real com o mesmo conjunto de autovalores

Se A (3×3) $\rightarrow$ A’ (6×6) A’ $\rightarrow$ Quantos λ? $\Rightarrow$ dupla degenerescência

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$\begin{pmatrix} B & -C \\ C & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Caso n=3

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & 0 & -c_{12} & -c_{13} \\ b_{12} & b_{22} & b_{23} & c_{12} & 0 & -c_{23} \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} & c_{13} & c_{23} & 0 \\ 0 & c_{12} & c_{13} & b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ -c_{12} & 0 & c_{23} & b_{12} & b_{22} & b_{23} \\ -c_{13} & -c_{23} & 0 & b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

Lembrar que os autovetores da matriz complexa A são: $\begin{pmatrix} x_1 + iy_1 \\ x_2 + iy_2 \\ x_3 + iy_3 \end{pmatrix}$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Problema de autovalores

matriz hermitiana complexa ⟺ matriz real simétrica

$n \times n$ $\qquad$ $2n \times 2n$

Consideremos matrizes reais e simétricas $\rightarrow$ encontrar os autovalores

Passos a seguir:

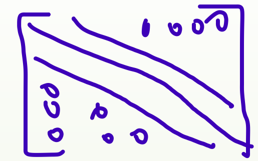
- Utilizar uma matriz ortogonal para realizar uma transformação de similaridade* à matriz real e simétrica A para transformá-la em uma matriz real, simétrica e tridiagonal A'.

- Encontrar os autovalores da matriz tridiagonal A'.

* transformação de similaridade: **Preserva os autovalores da matriz original**

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES



Tridiagonalizar a matriz real e simétrica $\rightarrow$ método de **HouseHolder**

n-2 transformações consecutivas para tridiagonalizar uma matriz de ordem n

As transformações são realizadas da seguinte forma:

$$A^{(k)} = O^{(k)T} A^{(k-1)} O^{(k)}$$ com $k = 1, 2 \ldots n$-2

$O^{(k)}$ é uma matriz ortogonal que trabalha nos elementos de linha com $i = k+2,\ldots,n$ da k[a] coluna e nos elementos de coluna $j = k+2,\ldots,n$ da k[a] linha.

A recursão começa com $A^{(0)} = A$

$O^{(k)}$???

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

A matriz ortogonal $O^{(k)}$ pode ser obtida a partir dos elementos da matriz A:

$$O^{(k)} = I - \frac{1}{\eta_k} w^{(k)} w^{(k)T}$$

sendo $w^{(k)}$ um vetor com n componentes

$$\eta_k = \alpha_k \left(\alpha_k + A^{(k-1)}_{kk+1} \right) \qquad \alpha_k = \pm \sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \left(A^{(k-1)}_{ki} \right)^2}$$

O sinal de α_k deve ser o mesmo de $A^{(k-1)}_{kk+1}$

A l^a componente do vetor $w^{(k)}$ é dada por:

$$w^{(k)}_l = \begin{cases} 0 & \text{para } l \leq k \\ A^{(k-1)}_{kl} + \alpha_k & \text{para } l = k+1 \\ A^{(k-1)}_{kl} & \text{para } l \geq k+2 \end{cases}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Exemplo para tridiagonalizar A

$$M = \begin{pmatrix} 4 & -2i \\ 2i & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_k = \pm\sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \left(A_{ki}^{(k-1)}\right)^2}$$

$$\alpha_1 = \pm\sqrt{A_{12}^2 + A_{13}^2 + A_{14}^2} = 2$$

$$\eta_1 = \alpha_1 \left(\alpha_1 + A_{kk+1}^{(k-1)}\right) = 2(2+0) = 4$$

$$w_l^{(k)} = \begin{cases} 0 & \text{para } l \leq k \\ A_{kl}^{(k-1)} + \alpha_k & \text{para } l = k+1 \\ A_{kl}^{(k-1)} & \text{para } l \geq k+2 \end{cases}$$

$$w^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$w^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad w^{(1)T} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad w^{(1)} w^{(1)T} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\eta_1} w^{(1)} w^{(1)T} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$O^{(1)} = I - \frac{1}{\eta_1} w^{(1)} w^{(1)T}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$O^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad O^{(1)T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^{(k)} = O^{(k)T} A^{(k-1)} O^{(k)}$$

$$A^{(0)} O^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 0 \\ -2 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

tridiagonal

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$A^{\boxed{(1)}} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & \boxed{0 \quad 0} \\ -2 & 2 & 0 & \boxed{0} \\ \boxed{0} & 0 & 4 & 2 \\ \boxed{0} & \boxed{0} & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

Foi realizada uma única sequência de transformações e a matriz ficou tridiagonalizada

Deveriam ter sido realizadas 4 – 2 = 2 transformações

A 1ª transformação atua sobre estes elementos

A 2ª transformação deveria atuar sobre estes elementos

Mas eles já ficaram zerados após a primeira transformação

Para matrizes de ordem superior, pode acontecer algo parecido sem a matriz estar na forma tridiagonal, Ex:

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & a_{45} & \boxed{a_{46}} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ 0 & 0 & 0 & \boxed{a_{64}} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix}$$

Ainda não é tridiagonal

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ 0 & 0 & 0 & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix}$$

Temos que continuar transformando

$$\alpha_k = \pm\sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \left(A_{ki}^{(k-1)}\right)^2}$$

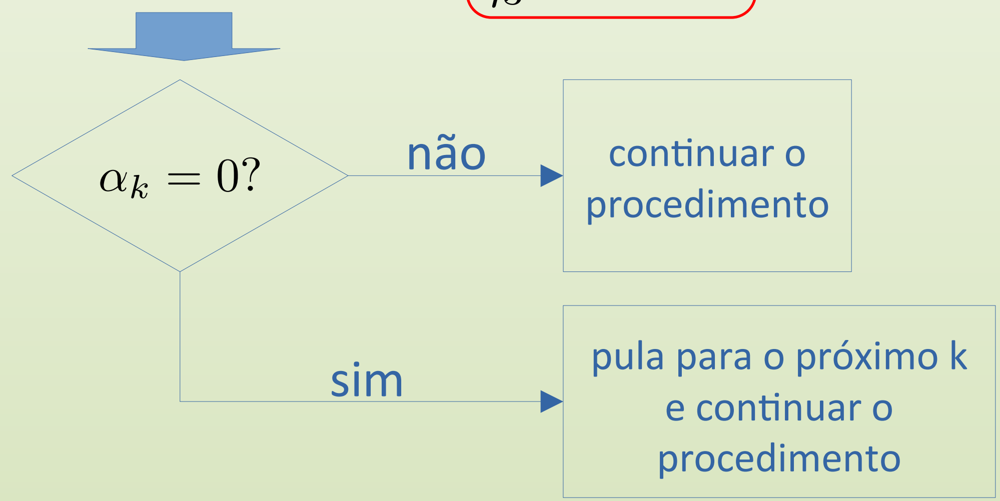
$$\alpha_3 = \pm\sqrt{A_{34}^{(2)2} + A_{35}^{(2)2} + A_{36^2}^{(2)}} = 0$$

$$\eta_3 = \alpha_3 \left(\alpha_3 + A_{34}^{(2)}\right) = 0$$

$$O^{(3)} = I - \boxed{\frac{1}{\eta_3} w^{(3)} w^{(3)T}}$$

nam

Em cada passo



FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Dada uma matriz quadrada de ordem n, o polinômio de grau n dado por:

$$P_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

é denominado polinômio característico da matriz A.

De forma geral, o problema de encontrar os n autovalores de uma matriz A (n×n), com autovetores φ de n componentes, satisfazendo:

$$A\varphi_n = \lambda_n \varphi_n$$

É equivalente ao de encontrar as n raízes do polinômio característico de A

$$P_A(\lambda) = 0$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Temos uma matriz tridiagonal com $A_{nm} = A_{mn}$

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & & & & & \\ A_{21} & A_{22} & A_{32} & & & & \\ & A_{32} & A_{33} & A_{43} & & & \\ & & A_{43} & & & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & & A_{n-1n-1} & A_{n-1n} \\ & & & & & A_{n-1n} & A_{nn} \end{pmatrix}$$

$$P_A(\lambda) = |A - \lambda I| = \begin{vmatrix} A_{11}-\lambda & A_{21} & & & & & \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & A_{32} & & & & \\ & A_{32} & A_{33}-\lambda & A_{43} & & & \\ & & A_{43} & & & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & & A_{n-1n-1}-\lambda & A_{n-1n} \\ & & & & & A_{n-1n} & A_{nn}-\lambda \end{vmatrix}$$

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Consideremos $P_j(\lambda) \rightarrow$ sub-determinante da matriz $(j \times j)$ (1ªs j linhas e j colunas)

$$P_1(\lambda) = A_{11} - \lambda \qquad\qquad P_2(\lambda) = (A_{22} - \lambda)\, P_1(\lambda) - A_{21}^2$$

$$P_3(\lambda) = \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{21} & 0 \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & A_{32} \\ 0 & A_{32} & A_{33} - \lambda \end{vmatrix}$$

$$P_3(\lambda) = (A_{11} - \lambda)\left[(A_{22} - \lambda)(A_{33} - \lambda) - A_{32}^2\right] - A_{21}\left[A_{21}(A_{33} - \lambda)\right]$$

$$P_3(\lambda) = (A_{11} - \lambda)(A_{22} - \lambda)(A_{33} - \lambda) - (A_{11} - \lambda)A_{32}^2 - A_{21}^2(A_{33} - \lambda)$$

$$P_3(\lambda) = (A_{33} - \lambda)\left[\underbrace{(A_{11} - \lambda)(A_{22} - \lambda) - A_{21}^2}_{P_2(\lambda)}\right] - A_{32}^2\underbrace{(A_{11} - \lambda)}_{P_1(\lambda)}$$

$$P_3(\lambda) = (A_{33} - \lambda)P_2(\lambda) - A_{32}^2 P_1(\lambda)$$

De forma geral: $P_n(\lambda) = (A_{nn} - \lambda)P_{n-1}(\lambda) - A_{nn-1}^2 P_{n-2}(\lambda)$ $\quad P_0(\lambda) = 1$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Encontrado o polinômio característico $\rightarrow$ achar as raízes (**autovalores de A**)

(algum dos métodos para determinação de raízes)

A propriedade das raízes de $P_n(\lambda)$ de estar no intervalo $[-\|A\|, \|A\|]$ onde:

$$\|A\| = \max\left\{\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|\right\} \text{ i = 1,2 ...n} \quad \text{ou} \quad \|A\| = \max\left\{\sum_{i=1}^{n}|A_{ij}|\right\} \text{ j = 1,2 ...n}$$

pode tornar mais fácil a busca das raízes de $P_n(\lambda)$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

$$P_n(\lambda) = (A_{nn} - \lambda)P_{n-1}(\lambda) - A^2_{nn-1}P_{n-2}(\lambda)$$

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & 0 \\ -2 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

$$P_0(\lambda) = 1$$

$$P_1(\lambda) = 4 - \lambda$$

$$P_2(\lambda) = (2 - \lambda)P_1(\lambda) - 4$$

$$P_3(\lambda) = (4 - \lambda)P_2(\lambda)$$

$$P_4(\lambda) = (2 - \lambda)P_3(\lambda) - 4P_2(\lambda)$$

$$P_4(\lambda) = (2 - \lambda)(4 - \lambda)((2 - \lambda)(4 - \lambda) - 4) - 4((2 - \lambda)(4 - \lambda) - 4)$$

$$P_4(\lambda) = (2 - \lambda)^2(4 - \lambda)^2 - 4(2 - \lambda)(4 - \lambda) - 4(2 - \lambda)(4 - \lambda) + 16$$

$$P_4(\lambda) = (2 - \lambda)^2(4 - \lambda)^2 - 8\overset{x}{\boxed{(2 - \lambda)(4 - \lambda)}} + 16 \quad \Longleftrightarrow \quad x^2 - 8x + 16$$

$$(x - 4)^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 4 \quad \Longleftrightarrow \quad (2 - \lambda)(4 - \lambda) = 4$$

$$\lambda^2 - 6\lambda + 4 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_{1,2} = 3 \pm \sqrt{5}$$

$$\lambda_1 = 0.763932$$

$$\lambda_1 = 5.236068$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Autovetores

Encontrados os autovalores de uma matriz tridiagonal $\rightarrow$ autovetores ?

Método de iteração do vetor inverso:

- Escolhe-se um valor arbitrário para o autovetor φ_n associado com λ_n.
- Refina-se esse valor utilizando: $\varphi_n^{(2)} = [A - (\lambda_n + \varepsilon)I]^{-1}\,\varphi_n^{(1)}$

ε é um escalar pequeno e diferente de zero

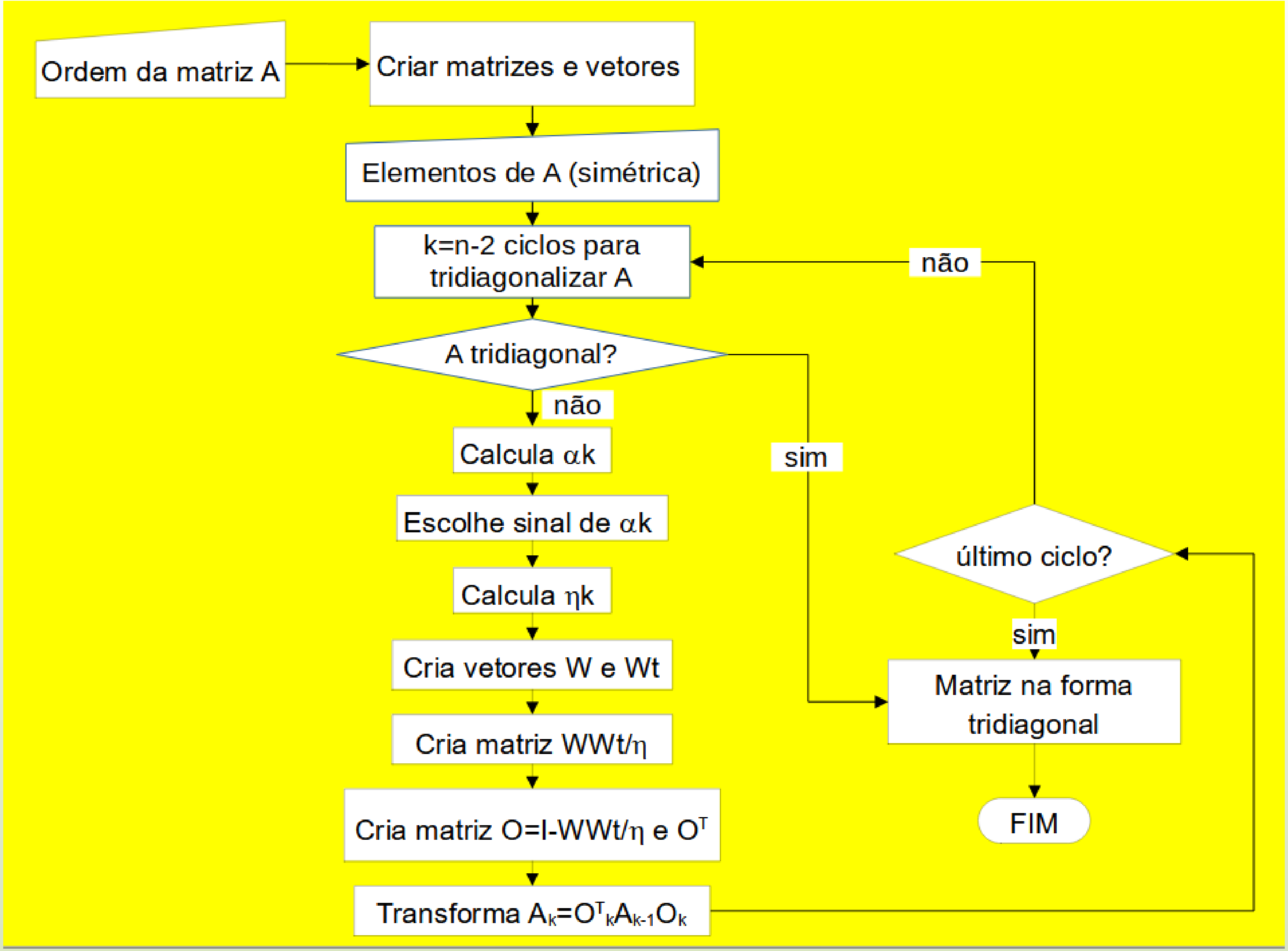
A $\rightarrow$ matriz original antes de sofrer a tridiagonalização.

Antes de cada passo de iteração, φ_n deve ser normalizado $\varphi_n = \dfrac{\varphi_n}{\|\varphi_n\|}$

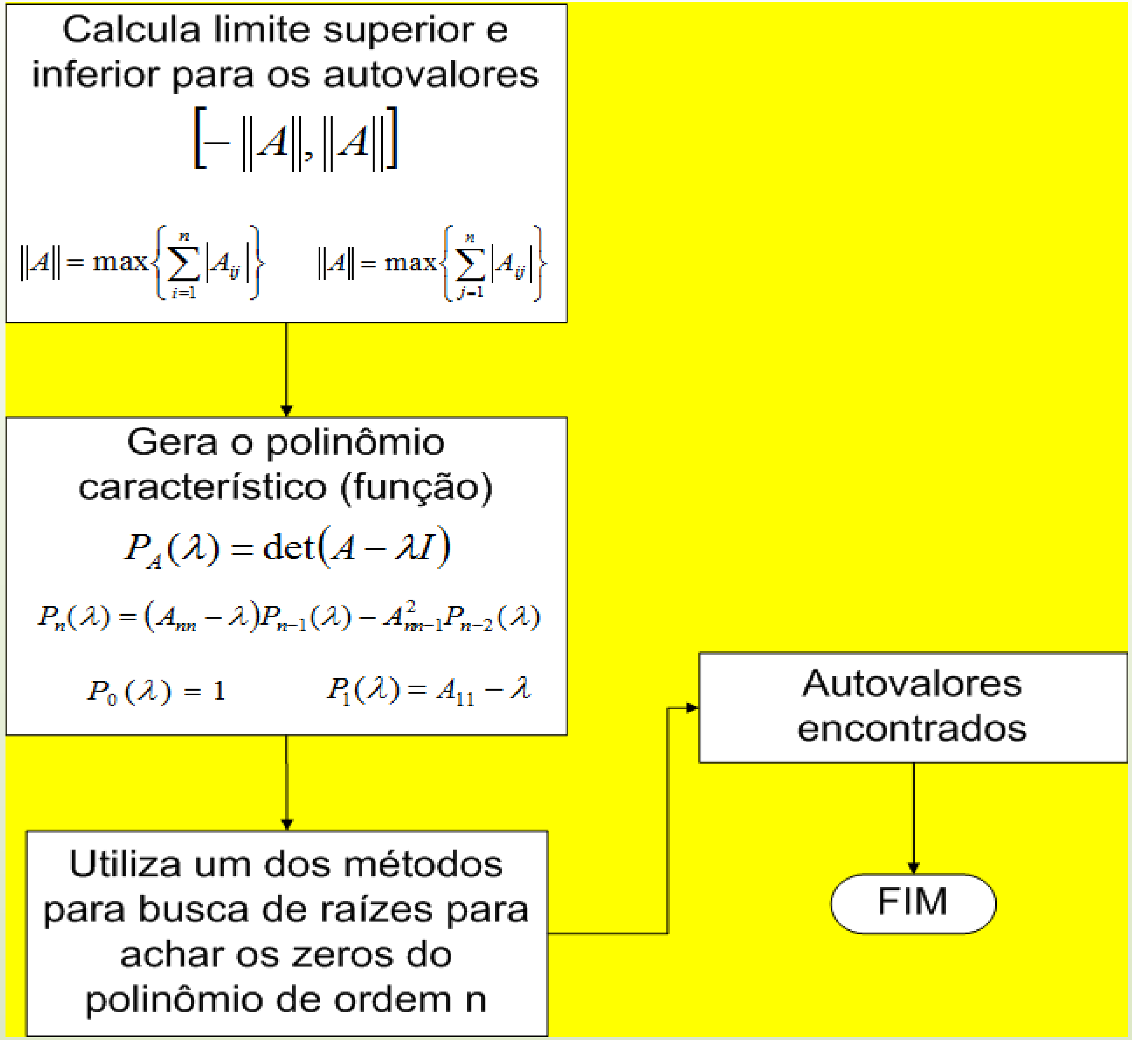
Lembrar que: $\|X\| = \sqrt{\sum x_i^2}$

O ciclo termina quando: $\left\|\varphi_n^{(m)} - \varphi_n^{(m-1)}\right\| < tol$

FÍSICA COMPUTACIONAL

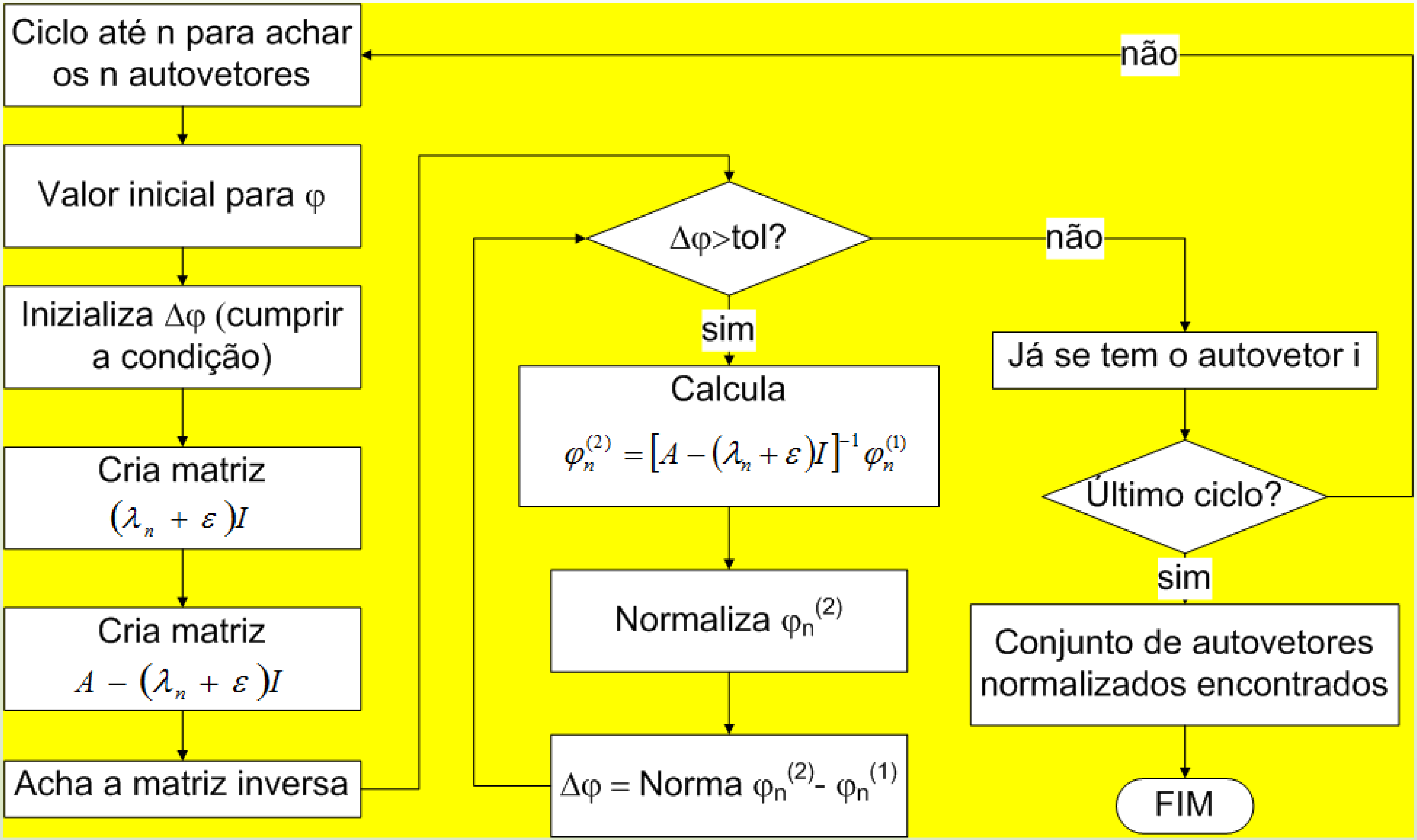


FÍSICA COMPUTACIONAL



FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver pasta



FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 4 - PROBLEMA DE AUTOVALORES E AUTOVETORES

Fazer um programa para encontrar os autovalores e autovetores de qualquer matriz complexa hermitiana de ordem n. Use o método estudado.

Peça para o usuário entrar com a ordem da matriz (n) e com os elementos complexos necessários para formar a matriz, ou seja, os elementos A_{ij} com $j \geq i$. Os elementos x+iy devem ser entrados da seguinte forma: x;y

Mostre na tela do computador a matriz complexa original, a matriz real e simétrica de ordem 2n com o mesmo conjunto de autovalores, a matriz real de ordem 2n tridiagonalizada, os autovalores encontrados, os autovetores complexos (z) correspondentes a cada autovalor e o resultado da operação:

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_i - \lambda_i \boldsymbol{z}_i$ (i =1...n) $\Leftrightarrow (Bx - Cy - \lambda x) + i(Cx + By - \lambda y)$

Para fazer o relatório, alimente seu programa com os elementos da seguinte matriz:

$$\begin{pmatrix} 5 & 4-7i & 2+i \\ 4+7i & 1 & 3-4i \\ 2-i & 3+4i & 8 \end{pmatrix}$$