UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

BC1419 Cálculo Numérico (1º 2021) - LISTA 1
Entrega: até 02/04/2021
Prof. André Pierro de Camargo

Orientações gerais

- A linguagem de programação utilizada na implementação dos métodos é de livre escolha.
- Peça ajuda ao professor sempre que necessário.
- Realize testes preliminares com cada método para identificar possíveis erros de implementação. Por exemplo: teste o método de eliminação de Gauss em sistemas de equações cuja solução seja previamente conhecida e veja se o resultado obtido é coerente.
- Discuta com os outros grupos e também com o professor caso encontre resultados aparentemente sem sentido. Isso pode (ou não) ser um erro de implementação, ou mesmo um indicativo de que o método utilizado possui as suas limitações.

Cada grupo deverá entregar

- Um relatório contendo a resolução dos exercícios teóricos e **TUDO** o que foi solicitado nos exercícios práticos (leiam a descrição com bastante atenção).
- O arquivo contendo o código fonte utilizado nos exercícios práticos.

Enviar o material por e-mail para andre.camargo@ufabc.edu.br, **especificando o número do grupo**.

Observação: Na Seção 3 encontram-se alguns dos algoritmos que serão utilizados nos exercícios práticos.

1 Exercício

Seja $A = (a_{i,j})$ uma matriz de tamanho $n \times n$ com coeficientes reais. Um número λ é dito um auto-valor de A se existe um vetor x com pelo menos um valor x_j diferente de zero tal que

$$A \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Em linguagem de sistemas de equações, isso equivale a dizer que o sistema

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \lambda - a_{1,1} & -a_{1,2} & -a_{1,3} & \dots & -a_{1,n} \\ -a_{2,1} & \lambda - a_{2,2} & -a_{2,3} & \dots & -a_{2,n} \\ -a_{3,1} & -a_{3,2} & \lambda - a_{3,3} & \dots & -a_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n,1} & -a_{n,2} & -a_{n,3} & \dots & \lambda - a_{n,n} \end{bmatrix}}_{V(A;\lambda)} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

possui alguma solução não trivial ou seja, com pelo menos um valor x_j diferente de zero. Nesse caso, o vetor $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ é chamado de um auto-vetor associado ao auto-valor λ.

O cálculo de auto-valores e auto-vetores faz parte integrante do curso de Álgebra Linear e é fundamental em diversos problemas de engenharia. Por exemplo, o artigo

`https://www.math.arizona.edu/~glickenstein/math443f08/bryanleise.pdf`

explica como o Google utiliza auto-valores e auto-vetores nos seus sistemas de busca.

Para determinar se λ é ou não um auto-valor da matriz A, calculamos o determinante $\det(V(A;\lambda))$ da matriz $V(A;\lambda)$ que aparece no lado esquerdo da equação (6). A teoria de Álgebra Linear nos diz que λ é um auto-valor de A se e somente se o determinante da matriz $V(A;\lambda)$ for igual à zero, ou seja,

$$\lambda \text{ é auto-valor de } A \quad \Longleftrightarrow \quad \det(V(A;\lambda)) \;=\; 0.$$

Mais abaixo explicaremos o que é e como calcular esse determinante. Por hora, observe que a matriz $V(A;\lambda)$, e, portanto, seu determinante, dependem do valor de λ. Logo, a regra

$$\lambda \xmapsto{f_A} \det(V(A;\lambda))$$

que associa, a cada valor de λ, o valor $\det(V(A;\lambda))$ é uma função $f_A(\lambda)$ de λ e o cálculo dos auto-valores de A corresponde a encontrar as soluções da equação

$$f_A(\lambda) \;=\; 0. \tag{3}$$

O objetivo desse exercício é calcular todos os auto-valores da matriz de tamanho $n \times n$

$$T_{G_n} \;=\; \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{1} & 0 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

A título de curiosidade, a matriz T_{G_n} aparece na teoria dos Grafos. Para fins de simplificar a notação, vamos escrever simplesmente T_n ao invés de T_{G_n}. Sabe-se que a equação

$$f_{T_n}(\lambda) \;=\; 0. \tag{5}$$

possui exatamente n soluções reais distintas no intervalo $[-2,2]$. Iremos calcular todas essa raízes utilizando os métodos aprendidos em classe (método da bissecção e método de Newton).

Na subsessão a seguir apresentamos os algoritmos utilizados para o cálculo da função $f_{T_n}(\lambda)$, e também de sua derivada $f'_{T_n}(\lambda)$.

1.1 Como calcular $f_{T_n}(\lambda)$?

O determinante det é uma função que associa, a cada matriz $A = (a_{i,j})$ de tamanho $n \times n$, o número denotado por $\det(A)$. Essa função possui propriedades bastante importantes. Por exemplo, para que o sistema

$$A \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{6}$$

tenha solução única (uma única para cada vetor $\mathbf{y}$), é necessário e suficiente que $\det(A) \neq 0$. No contexto do algoritmo da Eliminação de Gauss que estudamos nas aulas, essa condição é equivalente ao fato de conseguirmos realizar o processo de eliminação na matriz A até o final, ou seja, conseguir transformar a matriz A em uma matriz triangular superior

$$A' = \begin{bmatrix} a'_{1,1} & a'_{1,2} & a'_{1,3} & \dots & a'_{1,n} \\ 0 & a'_{2,2} & a'_{2,3} & \dots & a'_{2,n} \\ 0 & 0 & a'_{3,3} & \dots & a'_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a'_{n,n} \end{bmatrix} \tag{7}$$

que não possua nenhum valor igual a zero na diagonal, isto é,

$$a'_{i,i} \neq 0, \text{ para } i = 1, 2, \dots, n.$$

- Se o processo de eliminação não pode ser efetuado até o final (aparecem zeros na diagonal mesmo com troca de linhas), o determinante de A vale zero:

$$\det(A) = 0. \tag{8}$$

- Se o processo de eliminação $A \longmapsto A'$ pode ser efetuado até o fim, sem troca de linhas, o determinante de A é simplesmente o produto dos elementos da diagonal de A' isto é,

$$\det(A) = a'_{1,1} \times a'_{2,2} \times \dots \times a'_{n,n}. \tag{9}$$

- Se o processo de eliminação $A \longmapsto A'$ pode ser efetuado até o fim, porém com troca de linhas, a cada troca de linhas $j \leftrightarrow i$ com $i > j$ (i e j denotam aqui os índices das linhas a serem trocadas), deve ser acrescentado ao produto o fator $(-1)^{(j-i)}$. Assim, a expressão para o determinante fica

  $$\det(A) \;=\; a'_{1,1} \times a'_{2,2} \times \ldots \times a'_{n,n} \times (-1)^{i_1 - j_1} \times (-1)^{i_2 - j_2} \times \ldots \times (-1)^{i_\ell - j_\ell}, \tag{10}$$

  sendo $j_1 \leftrightarrow i_1$, $j_2 \leftrightarrow i_2$, $\ldots j_\ell \leftrightarrow i_\ell$ todas as trocas de linhas necessárias para realizar o processo de eliminação $A \longmapsto A'$.

  O sinal

  $$(-1)^{i_1 - j_1} \times (-1)^{i_2 - j_2} \times \ldots \times (-1)^{i_\ell - j_\ell}$$

  pode ser calculado simultaneamente ao processo de eliminação (ver Sessão 3 para mais detalhes)

Uma vez implementada a função funDet para calcular o determinante de uma matriz genérica A, para calular f_{T_n} basta montar a matriz $V(T_n; \lambda)$ e aplicar funDet($V(T_n; \lambda)$). Veja mais detalhes sobre os algoritmos na Sessão 3.

2 Tarefas

1. (2.0) Calcule $f_{T_n}(\lambda)$ para $\lambda = 0, 1, 2, 3$ e 4, para $n = 7$. Para $\lambda = 0$, exiba a matriz

$$V \;=\; \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{-1} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{-1} & 0 & \mathbf{-1} & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{-1} & 0 & \mathbf{-1} & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{-1} & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \mathbf{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \mathbf{-1} & 0 & \mathbf{-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \mathbf{-1} & 0 \end{bmatrix} \tag{11}$$

e a matriz V' obtida após a aplicação do processo de eliminação à matriz V, **com todas as casas decimais disponíveis**. Para fins de conferência, exibimos essas matrizes para $n = 6$:

```
 > V
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6]
[1,]    0   -1    0    0    0    0
[2,]   -1    0   -1    0    0    0
[3,]    0   -1    0   -1    0    0
[4,]    0    0   -1    0   -1    0
[5,]    0    0    0   -1    0   -1
[6,]    0    0    0    0   -1    0
> V_linha
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6]
[1,]   -1    0   -1    0    0    0
[2,]    0   -1    0    0    0    0
[3,]    0    0   -1    0   -1    0
[4,]    0    0    0   -1    0    0
[5,]    0    0    0    0   -1    0
[6,]    0    0    0    0    0   -1
> trocaLinhas
     [,1] [,2]
[1,]    1    2
[2,]    3    4
[3,]    5    6
>
```

Cada linha da matriz *trocaLinhas* exibida acima indica uma troca de linhas que foi feita durante o processo de Eliminação. Por exemplo, logo no início do processo, foi necessário trocar as linhas 1 e 2. Após eliminar os elementos da 1ª e da 2ª colunas, chegamos a matriz

```
 [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6]
[1,]   -1    0   -1    0    0    0
[2,]    0   -1    0    0    0    0
[3,]    0    0    0   -1    0    0
[4,]    0    0   -1    0   -1    0
[5,]    0    0    0   -1    0   -1
[6,]    0    0    0    0   -1    0
```

Daí, para continuar o processo, isto é, para eliminar os elementos abaixo da diagonal na coluna 3, foi necesário trocar as linhas 3 e 4 (isso é o que está indicado na seguna linha da matriz *trocaLinhas*. Depois, após eliminar os elementos da 3ª e da 4ª colunas, chegamos a matriz

```
  [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6]
[1,]   -1    0   -1    0    0    0
[2,]    0   -1    0    0    0    0
[3,]    0    0   -1    0   -1    0
[4,]    0    0    0   -1    0    0
[5,]    0    0    0    0    0   -1
[6,]    0    0    0    0   -1    0
```

Daí, para continuar o processo, isto é, para eliminar os elementos abaixo da diagonal na coluna 5, foi necesário trocar as linhas 5 e 6 (isso é o que está indicado na seguna linha da matriz *trocaLinhas*.

Dessa forma, o cálculo para $f_{T_n}(0)$ fica $f_{T_5}(0) \;=$

$$\begin{aligned} \det(V) &= v'_{1,1} \times v'_{2,2} \times v'_{3,3} \times v'_{4,4} \times v'_{5,5} \times (-1)^{2-1} \times (-1)^{4-3} \times (-1)^{6-5} \\ &= (-1)^6 \times (-1) \times (-1) \;\times (-1) = \;-1. \end{aligned}$$

2. (2.0) Para $n = 11$, calcule $f_{T_n}(\lambda)$ nos $3n{+}1$ pontos igualmente espaçados

$$x_i \;=\; -2 + i\frac{4}{3n}, i = 0, 1, 2, ..., (3 * n).$$

Para $n = 6$, por exemplo, temos os valores

```
          x          f
 [1,] -2.0000000  7.00000000
 [2,] -1.7777778 -0.41135140
 [3,] -1.5555556 -1.58935611
 [4,] -1.3333333 -0.51714678
 [5,] -1.1111111  0.66829432
 [6,] -0.8888889  1.11253554
 [7,] -0.6666667  0.76680384
 [8,] -0.4444444 -0.00219968
 [9,] -0.2222222 -0.71577654
[10,]  0.0000000 -1.00000000
[11,]  0.2222222 -0.71577654
[12,]  0.4444444 -0.00219968
[13,]  0.6666667  0.76680384
[14,]  0.8888889  1.11253554
[15,]  1.1111111  0.66829432
[16,]  1.3333333 -0.51714678
[17,]  1.5555556 -1.58935611
[18,]  1.7777778 -0.41135140
[19,]  2.0000000  7.00000000
```

A partir dos valores acima, podemos identificar que a função $f_{T_6}(\lambda)$ troca de sinal ao menos 6 vezes no intervalo $[-2, 2]$. Logo, há pelo menos uma raíz de $f_{T_6}(\lambda)$ em cada um dos intervalos a seguir

$$\begin{gathered}[-2.0000000, -1.7777778], \quad [-1.3333333, -1.1111111], \quad [-0.6666667, -0.4444444], \\ [0.4444444, 0.6666667], \quad [1.1111111, 1.3333333], \quad [1.7777778, 2.0000000].\end{gathered} \tag{12}$$

Pede-se: extrair dos valores calculados (para $n = 11$) os 11 intervalos, como os acima, onde a função $f_{T_{11}}(\lambda)$ troca de sinal.

3. (2.0) Em cada um dos 11 intervalos da forma $[x_j, x_{j+1}]$ calculados no item anterior, a função $f_{T_{11}}(\lambda)$ troca de sinal, isto é:

$$f_{T_{11}}(x_j) * f_{T_{11}}(x_{j+1}) \; < \; 0$$

e, portanto, existe pelo menos uma solução α_j da equação $f_{T_{11}}(\lambda) \; = \; 0$ no intervalo $[x_j, x_{j+1}]$.

Pede-se: Aplique o método da Bissecção para calcular as 11 raízes $\alpha_j, j = 1, 2, \ldots, 11$ com precisão $\epsilon = 10^{-5}$.

Para fins de conferência, as aproximações para as 6 raízes de f_{T_6} fornecidas por esse método com a mesma precisão e com os intervalos de busca fornecidos em (12), são:

```
> roots
[1] -1.8019477 -1.2469889 -0.4450412  0.4450412  1.2469889  1.801947
```

Teste o seu código com $n = 6$ para verificar se os valores gerados são compatíveis com os valores acima.

4. (1.0) Para λ no intervalo $[-2, 2]$, existe uma expressão analítica para a derivada da função f_{T_n} em termos das funções trigonométricas e trigonométricas inversas. Essa expressão é: $f'_{T_n}(\lambda) \; =$

$$\begin{cases} \frac{(n+1)^5-(n+1)^3}{3}, & \text{se } \lambda \; = \; 2, \\ (-1)^{n+1}\left[\frac{(n+1)^5-(n+1)^3}{3}\right], & \text{se } \lambda \; = \; -2, \\ \dfrac{(n+1)*\cos([n+1]*arccos(z)) - z\frac{\sin([n+1]*arccos(z))}{\sin(arccos(z))}}{2(z^2-1)}, & z = \lambda/2, \text{para } |\lambda| < 2. \end{cases}$$

Pede-se: Calcule $f'_{T_n}(\lambda)$ para $\lambda \in \{-1.9, -1.7, -1.4, 0, 1, 1.5, 2\}$ (exiba os valores com todas as casas decimais disponíveis).

5. (2.0) Utilizando a expressão para a derivada $f'_{T_n}(\lambda)$ acima, calcule novamente as raízes de $f_{T_{11}}(\lambda)$ pelo método de Newton, com precisão $\epsilon = 10^{-12}$. Em cada intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, utilize o ponto x_j como aproximação inicial para o método de Newton.

   Exiba os valores retornados pelo método. Comparando com os valores obtidos pelo método da bissecção, quais desses valores representam, de fato, raízes da equação dada?

6. (1.0) Repita os cálculos acima, porém, dessa vez, em cada intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, utilize o ponto médio $\frac{x_j+x_{j+1}}{2}$ como aproximação inicial para o método de Newton.

   Pode-se provar que as raízes exatas de $f_{T_{11}}$ são

$$\lambda_k \; = \; 2\cos\left(\frac{k\pi}{12}\right), \; k = 1, 2, \ldots, 11.$$

   Calcule os erros

$$|\lambda_k - \tilde{\lambda}_k|, \; k = 1, 2, \ldots, 11 \tag{13}$$

entre as raízes exatas (λ_k) e as raízes aproximadas ($\tilde{\lambda}_k$) calculadas pelo método de Newton e verifique se a precisão $\epsilon = 10^{-12}$ foi atingida ou não.

3 Algoritmos

3.1 Algoritmo para montar a matriz $V(T_n; \lambda)$

Dados de entrada: os valores n e λ.

- Defina uma matriz V de tamanho $n \times n$.
- Para $i = 1, 2, ...n - 1$, faça $V[i, i + 1] = -1$;
- Para $i = 1, 2, ...n - 1$, faça $V[i + 1, i] = -1$;
- Para $i = 1, 2, ...n$, faça $V[i, i] = \lambda$.

3.2 Algoritmo para calcular o determinante de uma matriz genérica A

Dados de entrada: uma matriz A de tamanho $m \times m$

- Defina a variável $sgn = 1$;
- Para j de 1 até m-1, faça
  - Se $A_{j,j} = 0$,
    - encontre k tal que $A_{k,j} \neq 0$ e troque as linhas j e k da Matriz A (se isso não for possível, então a matriz A é singular e convém exibir uma mensagem de erro).
    - faça $sgn = sgn * (-1)^{k-j}$.
  - Para i de j+1 até m, faça // elimina todos os elementos de A da // coluna j que estão abaixo da diagonal
    - Defina $\mu = -\frac{A_{i,j}}{A_{j,j}}$ // define o multiplo da linha j a ser somado à linha i da matriz A.
    - Para k de j até m, faça
      - $A_{i,k} = A_{ik} + \mu\ A_{j,k}$ // faz a operação desejada entre as linhas // da matriz A.
- Retorne o valor $\det = sgn \times A_{1,1} \times A_{2,2} \ldots \times A_{m,m}$.

3.3 Algoritmo da bissecção para encontrar raíz de $f(x) = 0$ com precisão ϵ

Dados de entrada: a função f; números m_0 e M_0 tais que $f(x_0)*f(M_0) < 0$; a precisão $\epsilon > 0$.

- Defina variáveis $m = m_0$; $M = M_0$ e $\alpha = \frac{m+M}{2}$
- Enquanto $f(\alpha - \epsilon) * f(\alpha + \epsilon) > 0$, faça
  - se $f(\alpha_k)f(m_k) < 0$, faça $M = \alpha$.
  - se $f(\alpha_k)f(m_k) > 0$, faça $m = \alpha$.
  - se $f(\alpha_k)f(m_k) = 0$, retorne α.
  - faça $\alpha = \frac{m+M}{2}$.
- retorne α.

3.4 Algoritmo de Newton para encontrar raíz de $f(x) = 0$ com precisão ϵ

Dados de entrada: a função f; a derivada f' de f; uma aproximação inicial x_0 para a solução da equação; a precisão $\epsilon > 0$; um intervalo de busca $[a, b]$; $Nmax$ = número máximo de iterações permitido.

- Defina a variável $\alpha = x_0$
- defina $i = 0$
- Enquanto $f(\alpha - \epsilon) * f(\alpha + \epsilon) > 0$ e $i \leq Nmax$,

  $i = i + 1$

  se $(a \geq \alpha$ e $\alpha \leq b)$ faça $\alpha = \alpha - \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)}$.
- retorne α.