Introdução à Computação em Física

AUTOVALORES E AUTOVETORES PROF. WALBER

Refs.:

Compact numerical methods for computers, Linear Algebra and function minimisation, J. C. Nash Applied numerical linear algebra, J. W. Demmel.

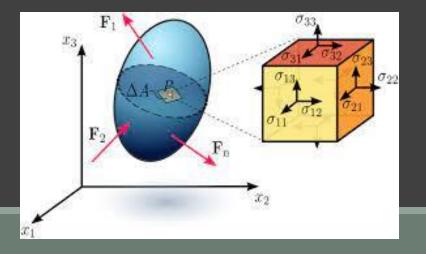
Autovalores e autovetores

Em diversas ocasiões, temos problemas que são descritos por uma equação de autovalores e autovetores:

$$Ax = \lambda x$$

A matriz quadrada X é um autovetor λ autovalor;

Estudo de vibrações, stress em sistemas contínuos, circuitos elétricos, etc.



Autovalores e autovetores

Em diversas ocasiões, temos problemas que são descritos por uma equação de autovalores e autovetores:

$$Ax = \lambda x$$

A matriz quadrada X é um autovetor λ autovalor;

Def.: Seja uma matriz A (n x n). O escalar λ é dito autovalor de A se existe um vetor x não nulo tal que Ax = λ x . O vetor x é chamado de autovetor associado a λ .

Iremos ver brevemente alguns métodos que nos permitem obter os diferentes valores de λ para uma dada matriz A, obtendo em alguns casos os autovetores x.

Polinômio característico

Nesse contexto, podemos obter os autovalores λ a partir dos zeros do chamado polinômio característico

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

Assim sendo, se p for o polinômio característico de A, os zeros de p são os autovalores de A.

Uma vez que os autovalores λ tenham sido determinados, pode-se obter os autovetores pela solução de

$$(A - \lambda I)x = 0$$

Matriz diagonal

Vale lembrar que:

- 1. Se uma matriz quadrada A de ordem n , tem n autovetores linearmente independentes, então escolhendo estes autovetores como base obtemos uma matriz diagonal similar a A;
- 2. Toda matriz quadrada com autovalores distintos pode ser reduzida a uma matriz diagonal, em que os elementos da diagonal são seus autovalores

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

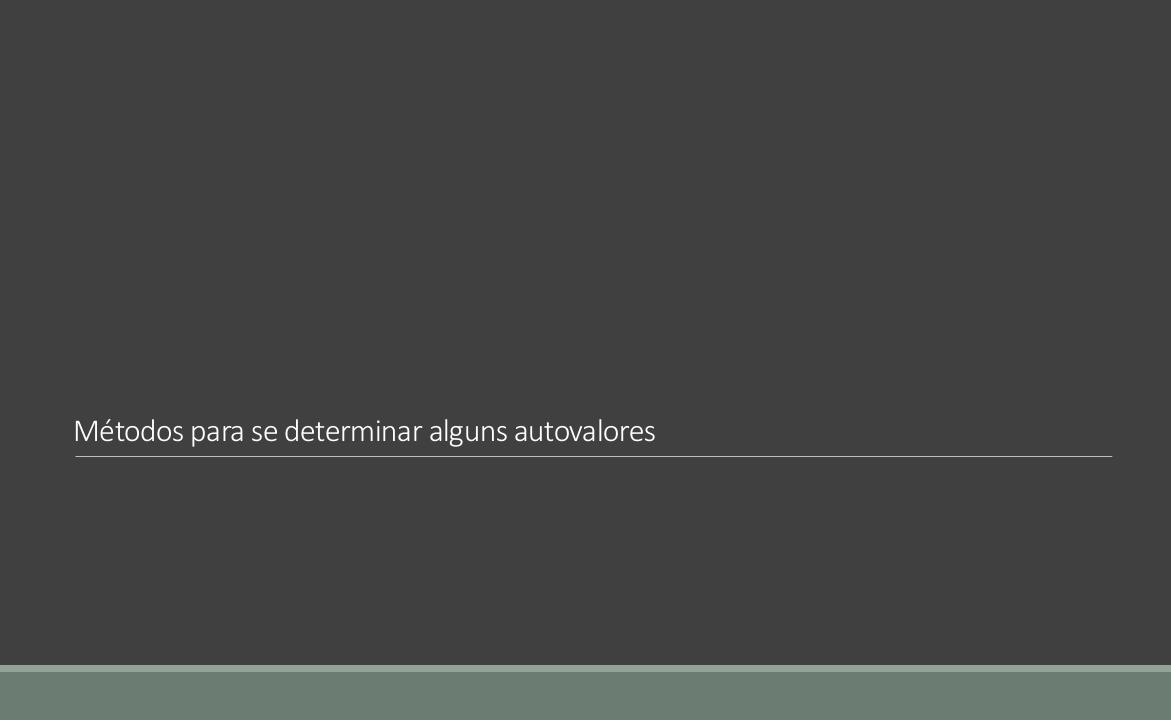
Onde λ_1 , λ_2 e λ_3 são os autovalores de A.

Métodos numéricos

Exceto nos casos de matrizes menores, o cálculo do determinante envolvendo o polinômio característico pode se tornar problemático.

Nesse sentido, iremos estudar métodos que não fazem uso do polinômio característico. Tais métodos podem ser classificados em:

- 1. Métodos que determinam alguns autovalores: veremos os chamados método das potências;
- 2. Métodos que determinam todos autovalores: Nesse caso veremos o método QR;



Seja A uma matriz real de ordem n e sejam $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ seus autovalores e u_1, u_2, \dots, u_n seus correspondentes autovetores. Suponha que os autovetores são linearmente independentes e que:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$$

Seja a sequência y_k definida por:

$$y_{k+1} = Ay_k(k = 0, 1, 2, \dots)$$

onde y_0 é um vetor arbritário que permite a expansão:

$$y_0 = \sum_{j=1}^n c_j u_j,$$

com c_j escalares quaisquer e $c_1 \neq 0$, então:

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{(y_{k+1})_r}{(y_k)_r},$$

onde r indica a r-ésima componente. Além disso, quando $k \to \infty$, y_k tende ao autovetor correspondente a λ_1 .

Método da potência

O método da potência consiste em um método iterativo para se obter o autovalor de uma dada matriz com maior módulo.

Este método se baseia no teorema ao lado.

Método da potência

Seja

$$Au_i = \lambda_i u_i$$

$$y_0 = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \ldots + c_n u_n$$

$$|\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \dots > |\lambda_n|$$

De nosso teorema, obtemos que:

$$y_1 = Ay_0 = c_1Au_1 + c_2Au_2 + \ldots + c_nAu_n$$

$$y_1 = \lambda_1 \left[c_1 u_1 + c_2 \frac{\lambda_2}{\lambda_1} u_2 + \ldots + c_n \frac{\lambda_n}{\lambda_1} u_n \right]$$



k iterações

$$y_k = \lambda_1^k \left[c_1 u_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k u_2 + \ldots + c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k u_n \right]$$

Razões de autovalores irão se anular no limite de k grande

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{(y_{k+1})_r}{(y_k)_r}$$

$$r=1,2,\ldots,n$$

Método da potência

Assim sendo, podemos determinar λ_1 através dos seguintes passos:

$$z_1 = Ay_0$$

$$y_1 = \frac{z_1}{\alpha_1} = \frac{Ay_0}{\alpha_1}$$

$$z_2 = Ay_1 = \frac{A^2y_0}{\alpha_1}$$

$$y_2 = \frac{z_2}{\alpha_2} = \frac{A^2y_0}{\alpha_1\alpha_2}$$

$$z_3 = Ay_2 = \frac{A^3y_0}{\alpha_1\alpha_2}$$
...

 $y_k = \frac{z_k}{\alpha_k} = \frac{A^k y_0}{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}$ $z_{k+1} = Ay_k = \frac{A^{k+1} y_0}{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}$

Onde y₀ é um vetor arbitrário não nulo.

$$\alpha_{k+1} = \max_{1 \le r \le n} |(z_{k+1})_r|$$

No final das iterações, o valor de λ_1 converge

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{(z_{k+1})_r}{(y_k)_r}$$

Método da potência

Vale destacar que se algum vetor resultar no vetor nulo então o método falha (associado a hipóteses);

Método tem a desvantagem de que não se sabe, no ínicio, se a matriz A tem ou não um único autovalor dominante;

Também não se sabe como y_0 poderia ser escolhido de modo a garantir que a representação contenha uma contribuição não nula do autovetor associado ao autovalor dominante, caso ele exista.

Método da potência inversa

Podemos fazer uso da matriz inversa de A para obter o menor autovalor (menor módulo).

Método similar ao visto anteriormente, embora queremos encontrar λ_n ,

$$|\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \dots > |\lambda_n|$$

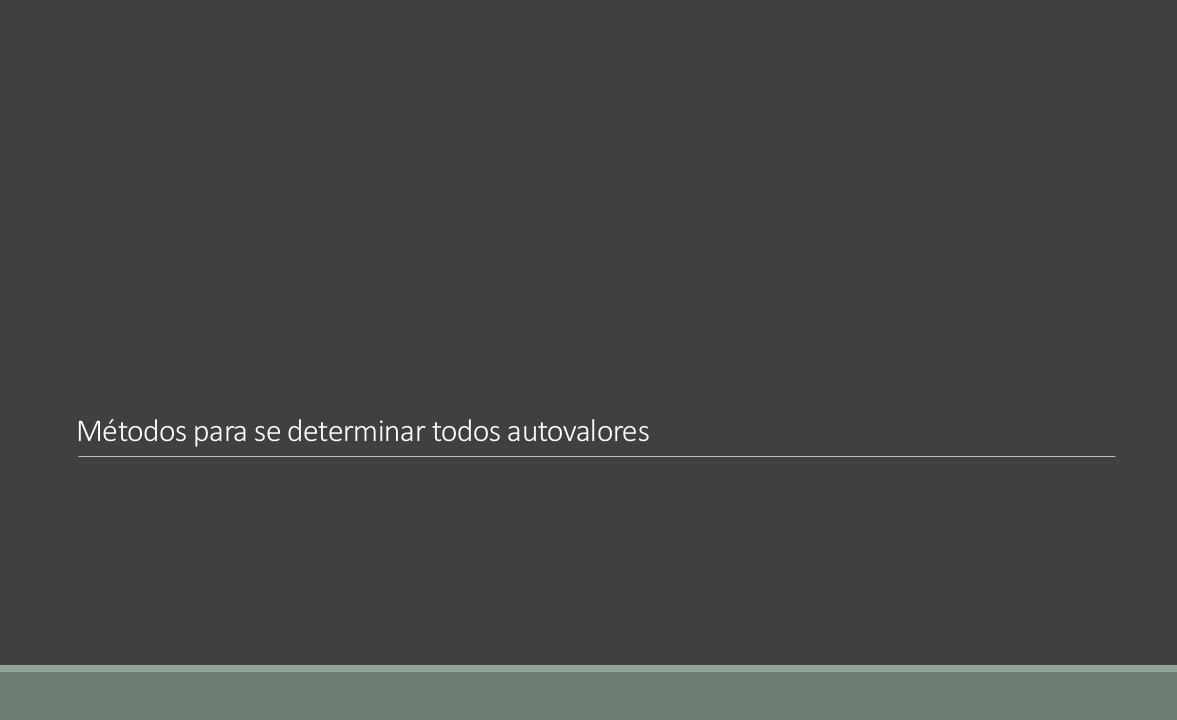
Temos que essencialmente substituir A por A^{-1} nos passos feitos anteriormente. Note que no final iremos obter $1/\lambda_n$.

Atividade prática:

1. Implemente o método da potência e potência inversa para calcular o maior e menor autovalor da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 2 & 5 & 3 \\ 0 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$
 Considere $y_0 = [1, 1, 1]$

Obs: O maior autovalor é 7.4437 e o menor é 1.3375



Método QR (método de Francis)

A ideia principal do método QR é determinar os autovalores de uma matriz A sem determinar seu polinômio característico;

Método consiste em obter uma sequência de matrizes A₁, A₂, ..., da seguinte maneira:

$$A_1 = A = Q_1 R_1$$

$$A_2 = R_1 Q_1 = Q_2 R_2$$

$$\cdots$$

$$A_k = R_{k-1} Q_{k-1} = Q_k R_k$$

$$\cdots$$

Onde Q_i é uma matriz ortogonal e R_i uma matriz triangular superior

$$Q^t Q = QQ^t = I$$

$$Q^t = Q^{-1}$$

Método QR

Em suma,

$$A_1 = A = Q_1 R_1$$

$$A_2 = R_1 Q_1 = Q_2 R_2$$

$$\cdots$$

$$A_k = R_{k-1} Q_{k-1} = Q_k R_k$$

$$\cdots$$

Onde Qi é uma matriz ortogonal e R_i uma matriz triangular superior

Uma matriz ortogonal Q é caracterizada por:

$$Q^t Q = QQ^t = I$$

$$Q^t = Q^{-1}$$

Q^t é a transposta de Q I é a matriz identidade de ordem n

Método QR

A sequência A_k converge para uma matriz triangular superior;

Os elementos diagonais da matriz A_k são os autovalores procurados;

O processo termina quando o elemento de maior valor absoluto da matriz A_k (abaixo da diagonal principal) for menor que uma dada precisão pré-fixada.

Diversos métodos para se obter as matrizes Q e R (não iremos entrar em detalhes).

$$A_1 = A = Q_1 R_1$$

$$A_2 = R_1 Q_1 = Q_2 R_2$$

$$\cdots$$

$$A_k = R_{k-1} Q_{k-1} = Q_k R_k$$

$$\cdots$$

Atividade prática

1. Implemente o método QR para calcular todos autovalores da matriz abaixo

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 2 & 5 & 3 \\ 0 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$

Para obtenção das matrizes Q e R, utilize a biblioteca Numpy

from numpy.linalg import qr

Q, R = qr(A)

Mais informações em: https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.qr.html

Obtenção geral via Numpy

De maneira geral podemos obter os autovalores e autovetores de uma matriz via Numpy, utilizando

```
import numpy as np from numpy.linalg import eig

Existe função similar na SciPy.

A = np.array([ [2.0, 1.0, 0.0], [2.0, 5.0, 3.0], [0.0, 1.0, 6.0]])

Mais informações:
```

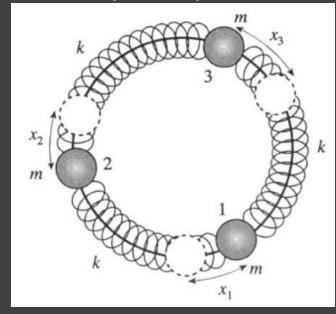
autova, autovet = eig(A)

https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.eig.html#numpy.linalg.eig

```
print ' Autovalores = ', autova
print ' Autovetores = ', autovet
```

Exemplo: massas acopladas por molas

3 massas acopladas por molas:



Equações de movimento para cada massa:

$$\frac{d^2x_1}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_1 - \frac{k}{m}(x_2 + x_3) = 0$$

$$\frac{d^2x_2}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_2 - \frac{k}{m}(x_1 + x_3) = 0$$

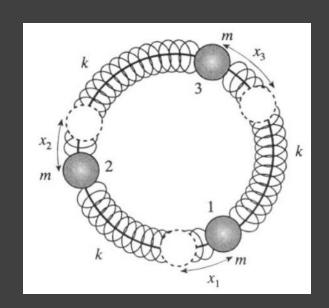
$$\frac{d^2x_3}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_3 - \frac{k}{m}(x_1 + x_2) = 0$$

Considerando solução harmônicas para descobrir as frequências de vibração

$$x_i = A_i e^{i\omega t}$$

Aplicação: massas acopladas por molas

3 massas acopladas por molas:



$$\left| \frac{d^2x_1}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_1 - \frac{k}{m}(x_2 + x_3) = 0 \right|$$

$$\frac{d^2x_2}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_2 - \frac{k}{m}(x_1 + x_3) = 0$$

$$\frac{d^2x_3}{dt^2} + \frac{2k}{m}x_3 - \frac{k}{m}(x_1 + x_2) = 0$$

$$\frac{2k}{m}A_1 - \frac{k}{m}A_2 - \frac{k}{m}A_3 = \omega^2 A_1$$

$$-\frac{k}{m}A_1 + \frac{2k}{m}A_2 - \frac{k}{m}A_3 = \omega^2 A_2$$

$$-\frac{k}{m}A_1 - \frac{k}{m}A_2 + \frac{2k}{m}A_3 = \omega^2 A_3$$

$$\begin{pmatrix} \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} & -\frac{k}{m} \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ -\frac{k}{m} & -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$$

Equação de autovalores e autovetores (autovalores)