Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Lista 4

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Sumário

1 Matrix Operations	rix Operations	2	
	1.1	Exercício 1	2

1 Matrix Operations

1.1 Exercício 1

Tarefa: Considere a matriz $n \times n$:

$$A = \begin{pmatrix} -5/2 & 4/3 & -1/12 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 4/3 & -5/2 & 4/3 & -1/12 & \dots & 0 & 0 \\ -1/12 & 4/3 & -5/2 & 4/3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1/12 & 4/3 & -5/2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -5/2 & 4/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 4/3 & -5/2 \end{pmatrix}$$

- Use o método de Householder para obter a correspondente matriz tridiagonal A_t .
- Verifique o produto $A_t = O^T A O$.
- Calcule o menor e o maior autovalor λ , e os correspondentes autovetores y_t , de A_t .
- Calcule os correspondentes autovetores y de A.
- Verifique a equação $Ay = \lambda y$ para esses autovalores.

Considere os casos n = 10 e n = 20.

O código foi compilado com o comando:

gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none L6-5255417-ex-1.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o L6-5255417-ex-1.exe

Resultados:

Obteve-se os seguintes resultados:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista6
 Insert matrix dimension:
10
 -----> N = 10 <-----
 Original Matrix A (first 5x5):
   -2.500000
              1.333333
                         -0.083333
                                      0.000000
                                                  0.000000
   1.333333
              -2.500000
                          1.333333 -0.083333
                                                 0.000000
   -0.083333
              1.333333
                          -2.500000
                                      1.333333
                                                 -0.083333
    0.000000
              -0.083333
                          1.333333
                                     -2.500000
                                                  1.333333
              0.000000
                         -0.083333
    0.000000
                                      1.333333
                                                 -2.500000
 Tridiagonal Matrix T (first 5x5):
   -2.500000
              -1.335935 0.000000
                                      0.000000
                                                 0.000000
   -1.335935
              -2.666018
                          1.333384
                                     0.000000
                                                 0.000000
   0.000000
              1.333384 -2.666649
                                      1.333335
                                                 -0.000000
                          1.333335
    0.000000
               0.000000
                                     -2.666666
                                                 1.333333
    0.000000
               0.000000
                         -0.000000
                                      1.333333
                                                 -2.666667
 --- Transformation Verification O^T A O = At ---
Difference norm ||At - 0^T A 0||: 0.38752E-14
Smallest eigenvalue (lambda_min): -0.08384774
Largest eigenvalue (lambda_max): -5.20135675
--- Verification for Eigenvalue smallest ---
Eigenvalue: -0.08384774
Norm of residual ||Ay - lambday||: 0.23811E-07
--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual ||Ay - lambday||: 0.15137E-05
```

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista6
> $ ./L6-5255417-ex-1.exe
Insert matrix dimension:
20
   ----> N = 20 <-----
 Original Matrix A (first 5x5):
   -2.500000
               1.333333
                          -0.083333
                                        0.000000
                                                    0.000000
    1.333333
               -2.500000
                            1.333333
                                       -0.083333
                                                    0.000000
   -0.083333
                1.333333
                           -2.500000
                                        1.333333
                                                   -0.083333
    0.000000
              -0.083333
                            1.333333
                                       -2.500000
                                                    1.333333
    0.000000
               0.000000
                           -0.083333
                                        1.333333
                                                   -2.500000
 Tridiagonal Matrix T (first 5x5):
   -2.500000
              -1.335935
                          0.000000
                                        0.000000
                                                    0.000000
   -1.335935
              -2.666018
                            1.333384
                                        0.000000
                                                   0.000000
                                        1.333335
    0.000000
                1.333384
                          -2.666649
                                                   -0.000000
               0.000000
    0.000000
                            1.333335
                                       -2.666666
                                                   1.333333
    0.000000
                0.000000
                           -0.000000
                                        1.333333
                                                   -2.666667
 --- Transformation Verification O^T A O = At ---
Difference norm ||At - 0^T A 0||: 0.92027E-14
Smallest eigenvalue (lambda_min): -0.02271117
Largest eigenvalue (lambda_max):
                                   -5.29651364
--- Verification for Eigenvalue smallest ---
Eigenvalue: -0.02271117
Norm of residual ||Ay - lambday||: 0.25484E-07
--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.29651364
Norm of residual ||Ay - lambday||: 0.15709E-05
```

Nota-se que todas as verificações resultaram em valores pequenos, mostrando que o método funcionou bem para ambos os casos. (O código gera dois arquivos - "At_eingenvalues.txt" e "A_eingenvalues.txt- com os autovetores de A_t e A - respectivamente - que não foram colocados no terminal para não poluir a vizualização dos resultados)