Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

Lista 4

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Maio de 2025

Sumário

1 Matrix Operations

1.1 Exercício 1

Tarefa: Calcule todos os autovalores da matriz simétrica e tridiagonal A, definida por:

$$A_{mm} = -2, \quad A_{m,m-1} = A_{m-1,m} = 1$$

a qual está relacionada à discretização da derivada segunda em uma dimensão:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

Use as seguintes relações de recorrência para o polinômio característico $P_n(\lambda) = \det(A - \lambda I)$:

$$\begin{aligned}
P_1(\lambda) &= A_{11} - \lambda, \\
P_2(\lambda) &= (A_{22} - \lambda)P_1(\lambda) - A_{21}A_{12}, \\
P_3(\lambda) &= (A_{33} - \lambda)P_2(\lambda) - A_{32}A_{23}P_1(\lambda), \\
&\vdots \\
P_m(\lambda) &= (A_{mm} - \lambda)P_{m-1}(\lambda) - A_{m,m-1}A_{m-1,m}P_{m-2}(\lambda), \\
&\vdots \\
P_n(\lambda) &= (A_{nn} - \lambda)P_{n-1}(\lambda) - A_{n,n-1}A_{n-1,n}P_{n-2}(\lambda).
\end{aligned}$$

Use o método de Newton-Raphson para calcular numericamente as raízes de $P_n(\lambda)$, ou seja, os autovalores da matriz A.

Sugestão: escreva uma relação de recorrência também para as derivadas primeira e segunda, em relação à variável λ, das funções $P_m(\lambda)$. Considere o caso $n \times n$, onde n é uma entrada (input) do código.

Compare os resultados numéricos com o resultado exato:

$$\lambda_m = -4\sin^2\left(\frac{m\pi}{2(n+1)}\right), \quad m = 1, 2, \ldots, n.$$

Sugestão: use as desigualdades

$$\max_{j=1,\ldots,n}\left(A_{jj} + \sum_{k\neq j}|A_{jk}|\right) \geq \lambda_m \geq \min_{j=1,\ldots,n}\left(A_{jj} - \sum_{k\neq j}|A_{jk}|\right)$$

para organizar a busca inicial das raízes de $P_n(\lambda)$.

Derivando a relação de recorrência com relação a lambda, obtemos:

$$P'_m(\lambda) = (A_{mm} - \lambda)P'_{m-1}(\lambda) - A_{m,m-1}A_{m-1,m}P'_{m-2}(\lambda) - P_{m-1}(\lambda)$$

Para determinar o chute inicial do Newton-Raphson, temos:

$$\begin{aligned} A_{jj} &= -2, \\ \sum_{k \neq j} |A_{jk}| &= |A_{j,j-1}| + |A_{j,j+1}| = 1 + 1 = 2, \quad \text{para } j = 2, \dots, n-1, \\ \sum_{k \neq j} |A_{jk}| &= 1, \quad \text{para } j = 1 \text{ ou } j = n, \end{aligned}$$

E, utilizando a desigualde dada, temos:

$$-4 \geq \lambda_{\text{máx}} \geq 0$$

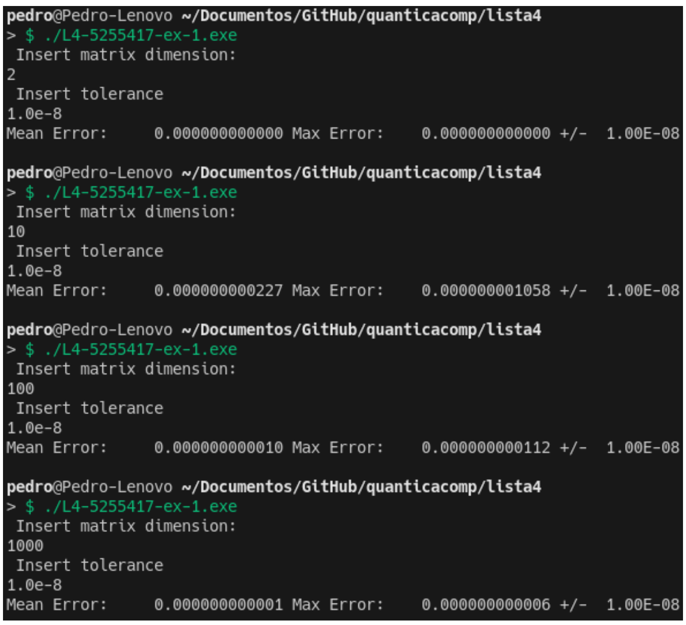
Logo, é razoável começar com o chute inicial entre 0 e -4.

O código foi compilado com o comando:

gfortran L4-5255417-ex-1.f90 -Wall -Wextra -pedantic -ffree-form -o L4-5255417-ex-1.exe

Resultados:

Testou-se os seguintes casos:


```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-1.exe
 Insert matrix dimension:
2
 Insert tolerance
1.0e-8
Mean Error:     0.000000000000 Max Error:    0.000000000000 +/-   1.00E-08

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-1.exe
 Insert matrix dimension:
10
 Insert tolerance
1.0e-8
Mean Error:     0.000000000227 Max Error:    0.000000001058 +/-   1.00E-08

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-1.exe
 Insert matrix dimension:
100
 Insert tolerance
1.0e-8
Mean Error:     0.000000000010 Max Error:    0.000000000112 +/-   1.00E-08

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-1.exe
 Insert matrix dimension:
1000
 Insert tolerance
1.0e-8
Mean Error:     0.000000000001 Max Error:    0.000000000006 +/-   1.00E-08
```

Figura 1: Dimensão da Matriz = 1000

Percebe-se que a diferença - tanto média quanto para o maior caso - se manteve dentro da tolerância em todos os casos mostrando a eficiância do método empregado.

1.2 Exercício 2

Tarefa: Considere a mesma matriz A do exercício anterior e o vetor $\vec{d}$ com elementos $d_i = \delta_{i,j}$, onde j é escolhido aleatoriamente entre os valores $1, 2, \ldots, n$. Deseja-se resolver numericamente o sistema de equações lineares $A\vec{x} = \vec{d}$, utilizando o **algoritmo de Thomas**, específico para matrizes tridiagonais.

O algoritmo consiste em duas fases: uma substituição direta modificada para calcular coeficientes intermediários d'_m e c'_m, e uma substituição retroativa para obter a solução final $\vec{x}$. Abaixo estão as fórmulas utilizadas:

$$
\begin{aligned}
d'_1 &= \frac{d_1}{b_1}, & c'_1 &= \frac{c_1}{b_1}, & \\
d'_m &= \frac{d_m - a_m d'_{m-1}}{b_m - a_m c'_{m-1}}, & c'_m &= \frac{c_m}{b_m - a_m c'_{m-1}}, & \text{para } m = 2, 3, \ldots, n-1, \\
d'_n &= \frac{d_n - a_n d'_{n-1}}{b_n - a_n c'_{n-1}}. & & &
\end{aligned}
$$

A solução $\vec{x}$ é então obtida pela substituição retroativa:

$$
\begin{aligned}
x_n &= d'_n, \\
x_m &= d'_m - c'_m x_{m+1}, \quad \text{para } m = n-1, n-2, \ldots, 1.
\end{aligned}
$$

Considere o caso de uma matriz tridiagonal de dimensão $n \times n$, com n sendo um input do código. Após resolver o sistema, verifique a solução calculando o vetor resíduo:

$$\vec{r} = A\vec{x} - \vec{d}.$$

Esse vetor deve ser próximo de zero (em norma) se a solução numérica estiver correta.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L4-5255417-ex-2.f90 -Wall -Wextra -pedantic -ffree-form -o L4-
```

Resultados:

Testou-se os seguintes casos:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
8
The solution x of Ax = d (with j = 1) and the residue vector are:
  1      -0.888889      0.000000
  2      -0.777778      0.000000
  3      -0.666667      0.000000
  4      -0.555556      0.000000
  5      -0.444444      0.000000
  6      -0.333333      0.000000
  7      -0.222222      0.000000
  8      -0.111111      0.000000

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
8
The solution x of Ax = d (with j = 5) and the residue vector are:
  1      -0.444444      0.000000
  2      -0.888889      0.000000
  3      -1.333333      0.000000
  4      -1.777778      0.000000
  5      -2.222222      0.000000
  6      -1.666667      0.000000
  7      -1.111111      0.000000
  8      -0.555556      0.000000
```

Figura 2: Testes para matriz de dimensão 8

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
10
The solution x of Ax = d (with j = 8) and the residue vector are:
  1     -0.272727      0.000000
  2     -0.545455      0.000000
  3     -0.818182      0.000000
  4     -1.090909      0.000000
  5     -1.363636      0.000000
  6     -1.636364      0.000000
  7     -1.909091      0.000000
  8     -2.181818      0.000000
  9     -1.454545      0.000000
 10     -0.727273      0.000000

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
10
The solution x of Ax = d (with j = 2) and the residue vector are:
  1     -0.818182      0.000000
  2     -1.636364      0.000000
  3     -1.454545      0.000000
  4     -1.272727      0.000000
  5     -1.090909      0.000000
  6     -0.909091      0.000000
  7     -0.727273      0.000000
  8     -0.545455      0.000000
  9     -0.363636      0.000000
 10     -0.181818      0.000000
```

Figura 3: Testes para matriz de dimensão 10

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
20
The solution x of Ax = d (with j = 3) and the residue vector are:
  1      -0.857143      0.000000
  2      -1.714286      0.000000
  3      -2.571429      0.000000
  4      -2.428571      0.000000
  5      -2.285714      0.000000
  6      -2.142857      0.000000
  7      -2.000000      0.000000
  8      -1.857143      0.000000
  9      -1.714286      0.000000
 10      -1.571429      0.000000
 11      -1.428571      0.000000
 12      -1.285714      0.000000
 13      -1.142857      0.000000
 14      -1.000000      0.000000
 15      -0.857143      0.000000
 16      -0.714286      0.000000
 17      -0.571429      0.000000
 18      -0.428571      0.000000
 19      -0.285714      0.000000
 20      -0.142857      0.000000
```

(a)

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista4
> $ ./L4-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
20
The solution x of Ax = d (with j = 15) and the residue vector are:
  1      -0.285714      0.000000
  2      -0.571429      0.000000
  3      -0.857143      0.000000
  4      -1.142857      0.000000
  5      -1.428571      0.000000
  6      -1.714286      0.000000
  7      -2.000000      0.000000
  8      -2.285714      0.000000
  9      -2.571429      0.000000
 10      -2.857143      0.000000
 11      -3.142857      0.000000
 12      -3.428571      0.000000
 13      -3.714286      0.000000
 14      -4.000000      0.000000
 15      -4.285714      0.000000
 16      -3.571429      0.000000
 17      -2.857143      0.000000
 18      -2.142857      0.000000
 19      -1.428571      0.000000
 20      -0.714286      0.000000
```

(b)

Figura 4: Teste para matriz de dimensão 20

Como todos os vetores resíduo obtidos foram nulos, sabemos que o código funciona de acordo com o esperado - obtendo o autovetor x corretamente.