COC473 - Lista 2

Pedro Maciel Xavier 116023847

25 de setembro de $2020\,$

Questão 1.:

Aqui está o trecho do código que implementa a função para o cálculo do maior autovalor e seu respectivo autovetor través do método das Potências ("Power Method"). As funções auxiliares se encontram no código completo, no apêndice.

```
1
            function power_method(A, n, x, 1) result (ok)
2
                 implicit none
3
                integer :: n
                integer :: k = 0
4
5
6
                double precision :: A(n, n)
7
                double precision :: x(n)
8
                double precision :: 1, 11
9
10
                logical :: ok
11
12
                Begin with random normal vector and set 1st component to
       zero
                x(:) = rand_vector(n)
13
                x(1) = 1.0D0
14
15
16
                Initialize Eigenvalues
17
                1 = 0.000
18
19
                Checks if error tolerance was reached
20
                do while (k < MAX_ITER)</pre>
21
                     11 = 1
22
23
                     x(:) = matmul(A, x)
24
25
                     Retrieve Eigenvalue
26
                     1 = x(1)
27
28
                     Retrieve Eigenvector
29
                     x(:) = x(:) / 1
30
31
                     if (dabs((1 - 11) / 1) < TOL) then
32
                         ok = .TRUE.
33
                         return
34
                     else
35
                         k = k + 1
36
                         continue
37
                     end if
38
                end do
39
                ok = .FALSE.
40
                return
41
            end function
```

Questão 2.:

O cálculo dos autovalores pelo método de Jacobi está implementado no código abaixo. As funções auxiliares, como a que calcula a matriz de rotação de *Givens* e a que gera uma matriz identidade estão no código completo, nos apêndices.

```
1
            function Jacobi_eigen(A, n, L, X) result (ok)
2
                 implicit none
3
                 integer :: n, i, j, u, v
                 integer :: k = 0
4
5
6
                double precision :: A(n, n), L(n, n), X(n, n), P(n, n)
7
                double precision :: y, z
8
9
                logical :: ok
10
11
                X(:, :) = id_matrix(n)
12
                L(:, :) = A(:, :)
13
14
                do while (k < MAX_ITER)</pre>
15
                     z = 0.0D0
16
                     do i = 1, n
17
                         do j = 1, i - 1
18
                             y = DABS(L(i, j))
19
20
                              Found new maximum absolute value
21
                              if (y > z) then
22
                                  u = i
23
                                  v = j
24
                                  z = y
25
                              end if
26
                         end do
27
                     end do
28
29
                     if (z \ge TOL) then
30
                         P(:, :) = given_matrix(L, n, u, v)
31
                         L(:, :) = matmul(matmul(transpose(P), L), P)
32
                         X(:, :) = matmul(X, P)
33
                         k = k + 1
34
                     else
35
                         ok = .TRUE.
36
                         return
37
                     end if
38
                 end do
39
                ok = .FALSE.
40
                return
41
            end function
```

Questão 3.:

Seja o seguinte sistema de equações Ax = B:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{bmatrix} \ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

a) Para obter o polinômio característico, calculamos

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = \begin{vmatrix} 3 - \lambda & 2 & 0 \\ 2 & 3 - \lambda & -1 \\ 0 & -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix}$$
$$= (3 - \lambda) \begin{vmatrix} 3 - \lambda & -1 \\ -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 3 - \lambda \end{vmatrix}$$
$$= (3 - \lambda)[(3 - \lambda)^2 - 1] - 4(3 - \lambda)$$
$$= (3 - \lambda)[(3 - \lambda)^2 - 5]$$
$$= (3 - \lambda)(\lambda^2 - 6\lambda + 4)$$

Buscando as raízes λ_i deste polinômio, podemos afirmar que $\lambda=3$ é um dos autovalores. Usando a fórmula de Bhaskara, encontramos os demais.

$$\Delta = (-6)^2 - 4 \cdot 1 \cdot 4 = 20$$

$$\implies \lambda_i = \frac{6 \pm \sqrt{20}}{2} = 3 \pm \sqrt{5}$$

Assim, $\lambda_i \in \{3 - \sqrt{5}, 3, 3 + \sqrt{5}\}$. Os autovetores \mathbf{v}_i , por outro lado, devem satisfazer

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$

Logo, um autovetor \mathbf{v} da forma $[x, y, z]^{\mathbf{T}}$ obedece

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda x \\ \lambda y \\ \lambda z \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$3x + 2y = \lambda x
2x + 3y - z = \lambda y
- y + 3z = \lambda z$$

de onde tiramos que

$$y = \frac{(\lambda - 3)}{2}x$$
$$z = 2x - (\lambda - 3)y = \frac{4 - (\lambda - 3)^2}{2}x$$

e com isso dizemos que todo autovetor de A tem a forma

$$\begin{bmatrix} 1\\ \frac{(\lambda-3)}{2}\\ \frac{4-(\lambda-3)^2}{2} \end{bmatrix}$$

Substituindo os autovalores na relação:

$$\mathbf{v} \in \left\{ \begin{bmatrix} 1\\ \frac{-\sqrt{5}}{2}\\ \frac{-1}{2} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\\ 0\\ 2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1\\ \frac{\sqrt{5}}{2}\\ \frac{-1}{2} \end{bmatrix} \right\} \quad \text{e} \quad \lambda \in \left\{ 3 - \sqrt{5}, 3, 3 + \sqrt{5} \right\}$$

respectivamente.

- b) Como todos os autovalores são positivos ($\lambda_i > 0$), podemos afirmar que **A** é positiva definida.
- c) O método da potência ("Power Method") consiste em, partindo de um vetor $\mathbf{x}^{(0)}$, cuja primeira componente é 1, aplicar sucessivamente a matriz \mathbf{A} sobre o vetor, normalizando suas demais entradas, dividindo-as pelo valor da primeira a cada iteração k. Seja $\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$. Assim, podemos dizer que

$$\mathbf{x}^{(k)} = \frac{\mathbf{y}^{(k-1)}}{\mathbf{y}_1^{(k-1)}}$$

Observando as entradas da matriz, afirmamos que

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{1}^{(k)} &= 3\mathbf{x}_{1}^{(k)} + 2\mathbf{x}_{2}^{(k)} \\ \mathbf{y}_{2}^{(k)} &= 2\mathbf{x}_{1}^{(k)} + 3\mathbf{x}_{2}^{(k)} - \mathbf{x}_{3}^{(k)} \\ \mathbf{y}_{3}^{(k)} &= -\mathbf{x}_{2}^{(k)} + 3\mathbf{x}_{3}^{(k)} \end{aligned}$$

e, portanto

$$\begin{split} \mathbf{x}_1^{(k)} &= 1 \\ \mathbf{x}_2^{(k)} &= \frac{2\mathbf{x}_1^{(k-1)} + 3\mathbf{x}_2^{(k-1)} - \mathbf{x}_3^{(k-1)}}{3\mathbf{x}_1^{(k-1)} + 2\mathbf{x}_2^{(k-1)}} \\ \mathbf{x}_3^{(k)} &= \frac{-\mathbf{x}_2^{(k-1)} + 3\mathbf{x}_3^{(k-1)}}{3\mathbf{x}_1^{(k-1)} + 2\mathbf{x}_2^{(k-1)}} \end{split}$$

Para calcular o valor de \mathbf{x} , tomemos o limite de $\mathbf{x}^{(k)}$ quando $k \to \infty$, sobre cada componente

$$\mathbf{x}_{1} = \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{1}^{(k)} = 1$$

$$\mathbf{x}_{2} = \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{2}^{(k)} = \frac{2 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{1}^{(k-1)} + 3 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{2}^{(k-1)} - \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{3}^{(k-1)}}{3 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{1}^{(k-1)} + 2 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{2}^{(k-1)}}$$

$$\mathbf{x}_{3} = \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{3}^{(k)} = \frac{-\lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{2}^{(k-1)} + 3 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{3}^{(k-1)}}{3 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{1}^{(k-1)} + 2 \lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{2}^{(k-1)}}$$

Como para toda sequência convergente $a_k \in \mathbb{R}$, $\lim_{k \to \infty} a_k = L \implies \lim_{k \to \infty} a_{k-1} = L$, segue que

$$\mathbf{x}_1 = 1$$

$$\mathbf{x}_2 = \frac{2 + 3\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3}{3 + 2\mathbf{x}_2}$$

$$\mathbf{x}_3 = \frac{-\mathbf{x}_2 + 3\mathbf{x}_3}{3 + 2\mathbf{x}_2}$$

Consequentemente,

$$\begin{cases} 3\mathbf{x}_2 + 2\mathbf{x}_2^2 & = & 2 + 3\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3 \\ 3\mathbf{x}_3 + 2\mathbf{x}_2\mathbf{x}_3 & = & -\mathbf{x}_2 + 3\mathbf{x}_3 \end{cases} \implies \begin{cases} 2\mathbf{x}_2^2 & = & 2 - \mathbf{x}_3 \\ 2\mathbf{x}_2\mathbf{x}_3 & = & -\mathbf{x}_2 \end{cases} \implies \begin{cases} \mathbf{x}_2 & = & \frac{\sqrt{5}}{2} \\ \mathbf{x}_3 & = & -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Portanto, o autovetor \mathbf{v}_{max} associado ao autovalor de maior módulo é

$$\mathbf{v}_{\text{max}} = \begin{bmatrix} 1\\ \frac{\sqrt{5}}{2}\\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

e, por construção, o maior autovalor $\lambda_{\rm max}$ é dado por

$$\lambda_{\max} = 3\mathbf{x}_1 + 2\mathbf{x}_2 = 3 + \sqrt{5}$$

d) Segue o passo-a-passo do algoritmo de Jacobi para autovalores, com uma tolerância $|a_{i,j}| \leq 10^{-3}$.

$$\mathbf{A}^{(0)} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{bmatrix} \ \mathbf{X}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0.707 \\ 0 & 5 & -0.707 \\ 0.707 & -0.707 & 3 \end{bmatrix} \ \mathbf{X}^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.707 & 0.707 & 0 \\ -0.707 & 0.707 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0.674 & 0.214 \\ 0.674 & 2.775 & 0 \\ 0.214 & 0 & 5.225 \end{bmatrix} \quad \mathbf{X}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.707 & 0.214 & -0.674 \\ -0.707 & 0.214 & -0.674 \\ 0 & 0.953 & 0.303 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.773 & 0 & 0.203 \\ 0 & 3.002 & 0.068 \\ 0.203 & 0.068 & 5.225 \end{bmatrix} \mathbf{X}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.602 & 0.429 & -0.674 \\ -0.738 & -0.023 & -0.674 \\ -0.304 & 0.903 & 0.303 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.764 & -0.003 & 0 \\ -0.003 & 3.002 & 0.068 \\ 0 & 0.068 & 5.234 \end{bmatrix} \quad \mathbf{X}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.632 & 0.429 & -0.646 \\ -0.707 & -0.023 & -0.707 \\ -0.317 & 0.903 & 0.289 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.764 & 0 & 0 \\ 0 & 3.002 & 0.068 \\ 0 & 0.068 & 5.234 \end{bmatrix} \mathbf{X}^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.632 & 0.428 & -0.646 \\ -0.707 & -0.022 & -0.707 \\ -0.316 & 0.904 & 0.289 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(6)} = \begin{bmatrix} 0.764 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 5.236 \end{bmatrix} \ \mathbf{X}^{(6)} = \begin{bmatrix} 0.632 & 0.447 & -0.632 \\ -0.707 & 0 & -0.707 \\ -0.316 & 0.894 & 0.316 \end{bmatrix}$$

Após 6 iterações, temos os autovalores aproximados de \mathbf{A} nas entradas da diagonal principal de $\mathbf{A}^{(6)}$, e seus respectivos autovetores nas respectivas colunas de $\mathbf{X}^{(6)}$.

- e) Vamos resolver agora o sistema Ax = b de quatro maneiras distintas.
- 1.: Cholesky

O método de Cholesky nos dá uma fórmula direta para a fatoração $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^{\mathsf{T}}$:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \sqrt{\mathbf{A}_{1,1}} & 0 & 0 \\ \frac{\mathbf{A}_{2,1}}{\mathbf{L}_{1,1}} & \sqrt{\mathbf{A}_{2,2} - \mathbf{L}_{2,1}^2} & 0 \\ \frac{\mathbf{A}_{3,1}}{\mathbf{L}_{1,1}} & \frac{(\mathbf{A}_{3,2} - \mathbf{L}_{3,1} \mathbf{L}_{2,1})}{L_{2,2}} & \sqrt{\mathbf{A}_{3,3} - \mathbf{L}_{3,1}^2 - \mathbf{L}_{3,2}^2} \end{bmatrix}$$

Portanto,

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0\\ \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{5}{3}} & 0\\ 0 & -\sqrt{\frac{3}{5}} & 2\sqrt{\frac{3}{5}} \end{bmatrix}$$

Resolvemos primeiro o sistema $\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{5}{3}} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{3}{5}} & 2\sqrt{\frac{3}{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \mathbf{y}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

de onde tiramos que

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\sqrt{\frac{5}{3}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por fim, resolvemos $\mathbf{L}^{\mathbf{T}}\mathbf{x} = \mathbf{y}$:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{3} & \frac{2}{\sqrt{3}} & 0\\ 0 & \sqrt{\frac{5}{3}} & -\sqrt{\frac{3}{5}}\\ 0 & 0 & 2\sqrt{\frac{3}{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1\\ \mathbf{x}_2\\ \mathbf{x}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\sqrt{\frac{5}{3}}\\ 0 \end{bmatrix}$$

e assim temos

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2.: Jacobi

Vamos analisar este algoritmo sob a perspectiva de sua matriz de transformação $\mathbf{J} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{T}$, onde $\mathbf{A} = \mathbf{S} - \mathbf{T}$ e \mathbf{S} é a matriz diagonal cujos elementos são idênticos aos da diagonal principal de \mathbf{A} . Vejamos:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -2 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix}$$

Calculamos então os autovalores de \mathbf{J} , que chamaremos Λ . Seja Θ a matriz dos autovetores de \mathbf{J} e Θ^{-1} a sua inversa.

$$\Lambda = \begin{bmatrix}
-\frac{\sqrt{5}}{3} & 0 & 0 \\
0 & \frac{\sqrt{5}}{3} & 0 \\
0 & 0 & 0
\end{bmatrix} \Theta = \begin{bmatrix}
-2 & -2 & \frac{1}{2} \\
-\sqrt{5} & \sqrt{5} & 0 \\
1 & 1 & 1
\end{bmatrix} \Theta^{-1} = \begin{bmatrix}
-\frac{1}{5} & -\frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\
-\frac{1}{5} & \frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\
\frac{2}{5} & 0 & \frac{4}{5}
\end{bmatrix}$$

Dizemos que uma iteração do método de Jacobi é representada pela relação $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{S}^{-1} \left(\mathbf{T} \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b} \right)$. Seja $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{b}$. A partir disso, reescrevemos a iteração como $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{J} \mathbf{x}^{(k)} + \hat{\mathbf{b}}$. Aplicando sucessivamente este operação temos:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{J}\mathbf{x}^{(k)} + \hat{\mathbf{b}}$$

$$\mathbf{x}^{(k+2)} = \mathbf{J}^2\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{J}\hat{\mathbf{b}} + \hat{\mathbf{b}}$$

$$\mathbf{x}^{(k+3)} = \mathbf{J}^3\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{J}^2\hat{\mathbf{b}} + \mathbf{J}\hat{\mathbf{b}} + \hat{\mathbf{b}}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{x}^{(k+m)} = \mathbf{J}^m\mathbf{x}^{(k)} + \sum_{j=0}^{m-1} \mathbf{J}^j\hat{\mathbf{b}}$$

O autovalor de maior módulo, $\lambda_{\rm max}=\frac{\sqrt{5}}{3}$ nos indica que o raio espectral da matriz de iteração é $\rho({\bf J})=|\frac{\sqrt{5}}{3}|\approx 0.7453<1$. Portanto, temos a garantia da convergência do método, vamos adiante.

Outra informação de grande valor que o raio espectral nos dá é a taxa de convergência. Sabemos que o comportamento do erro é limitado pela aplicação da matriz $\bf J$, segundo o qual vale

$$\mathbf{e}^{(k)} \approx \mathbf{J}^k \mathbf{e}^{(0)}$$
$$\therefore e^{(k)} \approx \rho \left(\mathbf{J}\right)^k e^{(0)}$$

onde temos o erro $e^{(k)} = ||\mathbf{e}^{(k)}|| = ||\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}||.$

Assim, podemos obter uma estimativa do número k de passos necessários para a convergência, supondo uma tolerância tol = 10^{-5} . Logo,

$$10^{-5} > e^{(k)} = \rho \left(\mathbf{J} \right)^k e^{(0)} = \left(\frac{\sqrt{5}}{3} \right)^k e^{(0)}$$

$$\log_{10} (10^{-5}) > \log_{10} \left[\left(\frac{\sqrt{5}}{3} \right)^{k} e^{(0)} \right]$$
$$-5 > k \log_{10} \left(\frac{\sqrt{5}}{3} \right) + \log_{10} \left(e^{(0)} \right)$$
$$\therefore k > \frac{5 + \log_{10} \left(e^{(0)} \right)}{-\log_{10} \left(\sqrt{5} / 3 \right)}$$

Vamos supor que $e^{(0)} = O(1)$, e assim temos que k > 39. Calcularemos, portanto, $\mathbf{x}^{(k)}$ da seguinte forma:

$$\begin{split} \mathbf{x}^{(k)} &= \mathbf{J}^k \mathbf{x}^{(0)} + \sum_{j=1}^k \mathbf{J}^{j-1} \hat{\mathbf{b}} \\ &= \Theta \Lambda^k \Theta^{-1} \mathbf{x}^{(0)} + \left[\sum_{j=1}^k \Theta \Lambda^{j-1} \Theta^{-1} \right] \hat{\mathbf{b}} \\ &= \Theta \Lambda^k \Theta^{-1} \mathbf{x}^{(0)} + \Theta \left[\sum_{j=0}^{k-1} \Lambda^j \right] \Theta^{-1} \hat{\mathbf{b}} \end{split}$$

Aqui trazemos o interessante fato de que

$$\sum_{j=0}^{k-1} \Lambda^j = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_1^j & & & \\ & \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_2^j & & & \\ & & \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_3^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1-\lambda_1^k}{1-\lambda_1} & & & \\ & \frac{1-\lambda_2^k}{1-\lambda_2} & & & \\ & & \frac{1-\lambda_3^k}{1-\lambda_3} \end{bmatrix}$$

uma vez que $\forall i \ \lambda_i \neq 1$.

Escolhendo k = 40 e $\mathbf{x}^{(0)} = [0, 0, 0]$, vamos às contas:

$$\mathbf{x}^{(40)} = 0 + \Theta \left[\sum_{j=0}^{39} \Lambda^j \right] \Theta^{-1} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{b}$$

Na forma matricial temos:

$$\mathbf{x}^{(40)} = \begin{bmatrix} -2 & -2 & \frac{1}{2} \\ -\sqrt{5} & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1 - (-\sqrt{5}/3)^{40}}{1 + \sqrt{5}/3} \\ \frac{1 + (\sqrt{5}/3)^{40}}{1 - \sqrt{5}/3} \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} & -\frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\ -\frac{1}{5} & \frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\ \frac{2}{5} & 0 & \frac{4}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\approx \begin{bmatrix} -2 & -2 & \frac{1}{2} \\ -\sqrt{5} & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.57294 \\ 3.92702 \\ 1 & 100000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} & -\frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\ -\frac{1}{5} & \frac{1}{2\sqrt{5}} & \frac{1}{10} \\ \frac{2}{5} & 0 & \frac{4}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(40)} \approx \begin{bmatrix} 0.999993\\ -0.999992\\ 0.000003 \end{bmatrix}$$

3.: Gauss-Seidel

Neste caso, temos a garantia da convergência, uma vez que a matriz é *positiva* (pois seus autovalores são todos positivos), além de ser *simétrica*.

No item anterior, a diagonalização da matriz de iteração foi possível devido ao fato de que **A** e **S** eram *simétricas*. Isto propagou esta propriedade às matrizes **T** e **J**. Neste caso, como a matriz de iteração relacionada ao algoritmo de *Gauss-Seidel* não é simétrica, não podemos contar com isso. Outras alternativas podem surgir nesse sentido, como a forma normal de *Jordan*. No entanto, ela é conhecida por não ser numericamente estável e não costuma ser utilizada.

Vamos portanto, nos contentar em seguir o algoritmo anterior, inicializando o processo de *Gauss-Seidel* com o vetor $\mathbf{x}^{(0)} = [0.999993, -0.999992, 0.000003]$ resultante do algoritmo anterior. Segue que:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1^{(1)} &= \frac{1}{3}(1 + 2 \cdot 0.999993) \approx 0.999995 \\ \mathbf{x}_2^{(1)} &= \frac{1}{3}(-1 - 2 \cdot 0.999995 + 0.000003) \approx -0.999996 \\ \mathbf{x}_3^{(1)} &= \frac{1}{3}(1 - 0.999995) \approx 0.000001 \end{aligned}$$

Calculando o resíduo temos:

$$R = \frac{||\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}||}{||\mathbf{x}^{(1)}||} \approx 3.1 \times 10^{-6}$$

e o algoritmo termina com

$$\mathbf{x} \approx \begin{bmatrix} 0.999995 \\ -0.999996 \\ 0.000001 \end{bmatrix}$$

4.: Autovalores e autovetores

Como **A** é simétrica, vale que $\mathbf{x} = \Theta \lambda^{-1} \Theta^{\mathbf{T}} \mathbf{b}$, onde λ é a matriz diagonal dos autovalores e Θ é a matriz dos autovetores. Logo,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{-\sqrt{5}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{5}}{2} \\ \frac{-1}{2} & 2 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3-\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3+\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{-\sqrt{5}}{2} & \frac{-1}{2} \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & \frac{\sqrt{5}}{2} & \frac{-1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

f) Sabemos que, para uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^n$ temos

$$\det\left(\mathbf{A}\right) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Portanto, det (**A**) = $3 \cdot (3 - \sqrt{5}) \cdot (3 + \sqrt{5}) = 12$.

Questão 4.:

Algoritmo 1.: Saída do Programa

```
1
    A:
2
        3.00000
                   2.00000
                               0.000001
3
        2.00000
                   3.00000
                              -1.00000|
        0.0000
4
                  -1.00000
                               3.000001
5
   b:
6
        1.00000|
   7
      -1.00000|
8
        1.00000|
9
   DET =
            12.000000000000000
10
   RAIO ESPECTRAL = 5.2360679804753349
11
   :: Decomposição LU (sem pivoteamento) ::
12
   L:
13
   1.00000
                   0.00000
                               0.00000|
14
        0.66667
                   1.00000
                               0.00000|
   15
        0.00000
                  -0.60000
                               1.00000|
16
   U:
17
        3.00000
                   2.00000
                               0.000001
        0.00000
                   1.66667
18
                              -1.00000|
   19
        0.0000
                   0.00000
   2.40000|
20
   у:
21
   1.00000|
22
       -1.66667|
23
        0.000001
   24
   x:
25
   1.00000|
26
   -1.00000|
27
        0.00000|
28
      Decomposição PLU (com pivoteamento) ::
29
   P:
30
                               0.000001
   1.00000
                   0.00000
31
        0.00000
                   1.00000
                               0.00000|
32
        0.00000
                   0.00000
                               1.00000|
33
   L:
34
        1.00000
                   0.00000
                               0.000001
35
        0.66667
                   1.00000
                               0.000001
36
        0.0000
                  -0.60000
                               1.00000|
37
   U:
38
                   2.00000
        3.00000
                               0.00000|
39
        0.00000
                   1.66667
                              -1.00000|
40
        0.0000
                   0.00000
                               2.400001
   41
   у:
42
        1.00000|
43
       -1.66667|
44
        0.000001
   45
   x:
46
       1.00000|
   47
       -1.00000|
48
   0.000001
49
  DET
```

```
50 | 12.00000000000000
51
   x:
52
  | |
     1.00000|
53
  -1.00000|
      0.00000|
54
55
   :: Decomposição de Cholesky ::
56
  L:
57
  1.73205 0.00000
                           0.000001
58
      1.15470
                1.29099
                           0.000001
  -0.77460
59
       0.00000
                           1.54919|
  60
  y:
61
  11
      0.57735|
62
      -1.29099|
63
  -0.000001
64
  x:
     1.00000|
65
  66
  -1.00000|
67
  -0.000001
  :: Método de Jacobi ::
  Matriz mal-condicionada.
70
   :: Método de Gauss-Seidel ::
71
  A:
72
      3.00000
              2.00000 0.00000|
  73 | |
      2.00000
              3.00000
                         -1.00000|
74
  П
      0.00000
                -1.00000
                         3.000001
75
  x:
76
  1.00000|
77
  | | -1.00000|
78
  -0.000001
79
  b:
80
     1.000001
  81
  -1.00000|
82
  1.00000|
83
   e = 6.2803698347351007E-016
84
  :: Método das Potências (Power Method) ::
85
   x:
86
  1.00000|
87
     1.11803|
88
  | -0.50000|
89
  lambda:
   5.2360680332272143
  :: Método de autovalores de Jacobi ::
92
  L:
93
  П
       0.76393
               0.00000
                           0.000001
94
       0.00000 3.00000 -0.00000|
  | |
      0.00000 -0.00000 5.23607|
95
  11
96
  X:
97
   - 1
      0.63246
               0.44721 -0.63246|
98
  -0.70711
              0.00000 -0.70711|
99
      -0.31623
              0.89443 0.31623|
```

Appendices

Código

```
1
       Matrix Module
2
3
       module Matrix
4
           implicit none
           integer :: NMAX = 1000
5
6
           integer :: KMAX = 1000
7
8
           integer :: MAX_ITER = 1000
9
10
           double precision :: TOL = 1.0D-8
11
       contains
12
           13
           subroutine error(text)
14
               Red Text
15
                implicit none
16
                character(len=*) :: text
                write (*, *) ''//achar(27)//'[31m'//text//''//achar(27)//'
17
18
           end subroutine
19
20
           subroutine warn(text)
21
                Yellow Text
22
                implicit none
23
                character(len=*) :: text
                write (*, *) ''//achar(27)//'[93m'//text//''//achar(27)//'
24
                   [Om'
25
           end subroutine
26
27
           subroutine info(text)
28
                Green Text
29
                implicit none
30
                character(len=*) :: text
                write (*, *) ''//achar(27)//'[32m'//text//''//achar(27)//'
31
                   [Om'
32
           end subroutine
33
34
           subroutine ill_cond()
35
                Prompts the user with an ill-conditioning warning.
36
                implicit none
37
                call error('Matriz mal-condicionada: este método não irá
                   convergir.')
38
           end subroutine
39
40
           subroutine print_matrix(A, m, n)
41
                implicit none
42
43
                integer :: m, n
```

```
44
                double precision :: A(m, n)
45
46
                integer :: i, j
47
                format(' /', F10.5, ' ')
48
   20
49
   21
                format(F10.5, '/')
50
                format(F10.5, ' ')
   22
51
52
                do i = 1, m
                    do j = 1, n
53
54
                         if (j == 1) then
55
                             write(*, 20, advance='no') A(i, j)
56
                         elseif (j == n) then
57
                             write(*, 21, advance='yes') A(i, j)
58
                         else
59
                             write(*, 22, advance='no') A(i, j)
60
                         end if
61
                     end do
62
                end do
63
            end subroutine
64
65
            subroutine read_matrix(fname, A, m, n)
66
                implicit none
67
                character(len=*) :: fname
68
                integer :: m, n
69
                double precision, allocatable :: A(:, :)
70
71
                integer :: i
72
73
                open(unit=33, file=fname, status='old', action='read')
74
                read(33, *) m
75
                read(33, *) n
76
                allocate(A(m, n))
77
78
                do i = 1, m
79
                    read(33,*) A(i,:)
80
                end do
81
82
                close(33)
83
            end subroutine
84
85
            subroutine print_vector(x, n)
86
                implicit none
87
88
                integer :: n
89
                double precision :: x(n)
90
91
                integer :: i
92
                format(' | ', F10.5, '|')
93
   30
94
95
                do i = 1, n
96
                    write(*, 30) x(i)
```

```
97
                 end do
98
             end subroutine
99
100
             subroutine read_vector(fname, b, t)
101
                 implicit none
102
                 character(len=*) :: fname
103
                 integer :: t
104
                 double precision, allocatable :: b(:)
105
106
                 open(unit=33, file=fname, status='old', action='read')
107
                 read(33, *) t
108
                 allocate(b(t))
109
110
                 read(33,*) b(:)
111
112
                 close(33)
113
             end subroutine
114
115
             ======= Matrix Methods ========
116
             function rand_vector(n) result (x)
117
                 implicit none
118
                 integer :: n
119
                 double precision :: x (n)
120
121
                 integer :: i
122
123
                 do i = 1, n
124
                     x(i) = 2 * ran(0) - 1
125
                 end do
126
                 return
127
             end function
128
129
             function rand_matrix(m, n) result (A)
130
                 implicit none
131
                 integer :: m, n
132
                 double precision :: A(m, n)
133
134
                 integer :: i
135
136
                 do i = 1, m
137
                     A(i, :) = rand_vector(n)
138
                 end do
139
                 return
140
             end function
141
142
             function id_matrix(n) result (A)
143
                 implicit none
144
145
                 integer :: n
146
                 double precision :: A(n, n)
147
148
                 integer :: j
149
```

```
150
                 A(:, :) = 0.0D0
151
152
                 do j = 1, n
153
                     A(j, j) = 1.0D0
154
                 end do
155
                 return
156
             end function
157
158
             function given_matrix(A, n, i, j) result (G)
159
                 implicit none
160
161
                 integer :: n, i, j
162
                 double precision :: A(n, n), G(n, n)
163
                 double precision :: t, c, s
164
165
                 G(:, :) = id_matrix(n)
166
167
                 t = 0.5D0 * DATAN2(2.0D0 * A(i,j), A(i, i) - A(j, j))
168
                 s = DSIN(t)
169
                 c = DCOS(t)
170
171
                 G(i, i) = c
172
                 G(j, j) = c
173
                 G(i, j) = -s
174
                 G(j, i) = s
175
176
                 return
177
             end function
178
179
180
             function diagonally_dominant(A, n) result (ok)
181
                 implicit none
182
183
                 integer :: n
184
                 double precision :: A(n, n)
185
186
                 logical :: ok
187
                 integer :: i
188
189
                 do i = 1, n
190
                     if (DABS(A(i, i)) < SUM(DABS(A(i, :i-1))) + SUM(DABS(A(i, :i-1)))
                         i, i+1:)))) then
191
                          ok = .FALSE.
192
                          return
193
                      end if
194
                 end do
                 ok = .TRUE.
195
196
                 return
197
             end function
198
199
             recursive function positive_definite(A, n) result (ok)
200
            Checks wether a matrix is positive definite
             according to Sylvester's criterion.
201 | !
```

```
202
                  implicit none
203
204
                  integer :: n
205
                  double precision A(n, n)
206
207
                  logical :: ok
208
209
                  if (n == 1) then
210
                      ok = (A(1, 1) > 0)
211
                      return
212
                  else
                      ok = positive_definite(A(:n-1, :n-1), n-1) . AND. (det(A
213
                          , n) > 0)
214
                      return
215
                  end if
216
             end function
217
218
             function symmetrical(A, n) result (ok)
219
                 Check if the Matrix is symmetrical
220
                  integer :: n
221
                  double precision :: A(n, n)
222
223
224
                  integer :: i, j
225
                  logical :: ok
226
227
                  do i = 1, n
228
                      do j = 1, i-1
                           if (A(i, j) /= A(j, i)) then
229
230
                               ok = .FALSE.
231
                               return
232
                           end if
233
                      end do
234
                  end do
235
                  ok = .TRUE.
236
                  return
237
             end function
238
239
             subroutine swap_rows(A, i, j, n)
240
                  implicit none
241
                  {\tt integer} \; :: \; {\tt n}
242
                  integer :: i, j
243
244
                  double precision A(n, n)
245
                  double precision temp(n)
246
                  temp(:) = A(i, :)
247
248
                  A(i, :) = A(j, :)
249
                  A(j, :) = temp(:)
250
             end subroutine
251
252
             function row_max(A, j, n) result(k)
253
                  implicit none
```

```
254
255
                 integer :: n
256
                 double precision A(n, n)
257
258
                 integer :: i, j, k
259
                 double precision :: s
260
                 s = 0.0D0
261
262
                 do i = j, n
                     if (A(i, j) > s) then
263
264
                          s = A(i, j)
265
                          k = i
266
                      end if
267
                 end do
268
                 return
269
             end function
270
271
             function pivot_matrix(A, n) result (P)
272
                 implicit none
273
274
                 integer :: n
275
                 double precision :: A(n, n)
276
277
                 double precision :: P(n, n)
278
279
                 integer :: j, k
280
281
                 P = id_matrix(n)
282
283
                 do j = 1, n
284
                     k = row_max(A, j, n)
285
                     if (j /= k) then
286
                          call swap_rows(P, j, k, n)
287
                     end if
288
                 end do
289
                 return
290
             end function
291
292
             function vector_norm(x, n) result (s)
293
                 implicit none
294
295
                 integer :: n
296
                 double precision :: x(n)
297
298
                 double precision :: s
299
300
                 s = sqrt(dot_product(x, x))
301
                 return
302
             end function
303
304
             function matrix_norm(A, n) result (s)
305
                 Frobenius norm
306
                 implicit none
```

```
307
                  {\it integer} \ :: \ n
308
                  double precision :: A(n, n)
                  \  \, \textit{double precision} \, :: \, \, \textbf{s}
309
310
311
                  s = DSQRT(SUM(A * A))
312
                  return
313
             end function
314
315
             function spectral_radius(A, n) result (r)
316
                  implicit none
317
318
                  integer :: n
319
                  double precision :: A(n, n), x(n)
320
                  double precision :: r, l
321
322
                  logical :: ok
323
324
                 ok = power_method(A, n, x, 1)
325
326
                  r = DABS(1)
327
                  return
328
             end function
329
330
             recursive function det(A, n) result (d)
331
                  implicit none
332
333
                  integer :: n
334
                  double precision :: A(n, n)
335
                  double precision :: X(n-1, n-1)
336
337
                  integer :: i
338
                  double precision :: d, s
339
340
                  if (n == 1) then
                      d = A(1, 1)
341
342
                      return
343
                  elseif (n == 2) then
344
                      d = A(1, 1) * A(2, 2) - A(1, 2) * A(2, 1)
345
                      return
346
                  else
347
                      d = 0.0D0
348
                      s = 1.0D0
349
                      do i = 1, n
350
                           Compute submatrix X
351
                           X(:, :i-1) = A(2:,
                                                   :i-1)
352
                           X(:, i:) = A(2:, i+1:
353
354
                           d = s * det(X, n-1) * A(1, i) + d
355
                           s = -s
356
                      end do
357
                  end if
358
                  return
359
             end function
```

```
360
361
             function LU_det(A, n) result (d)
362
                 implicit none
363
364
                 integer :: n
365
                 integer :: i
366
                 double precision :: A(n, n), L(n, n), U(n, n)
367
                 double precision :: d
368
369
                 d = 0.0D0
370
371
                 if (.NOT. LU_decomp(A, L, U, n)) then
372
                     call ill_cond()
373
                     return
374
                 end if
375
376
                 do i = 1, n
377
                     d = d * L(i, i) * U(i, i)
378
379
380
                 return
381
             end function
382
383
             subroutine LU_matrix(A, L, U, n)
384
                 Splits Matrix in Lower and Upper-Triangular
385
                 implicit none
386
387
                 integer :: n
388
                 double precision :: A(n, n), L(n, n), U(n, n)
389
390
                 integer :: i
391
392
                 L(:, :) = 0.0D0
393
                 U(:, :) = 0.0D0
394
                 do i = 1, n
395
                     L(i, i) = 1.0D0
396
397
                     L(i, :i-1) = A(i, :i-1)
398
                     U(i, i:
                              ) = A(i, i: )
399
                 end do
400
             end subroutine
401
402
             === Matrix Factorization Conditions ===
403
             function Cholesky_cond(A, n) result (ok)
404
                 implicit none
405
406
                 integer :: n
407
                 double precision :: A(n, n)
408
409
                 logical :: ok
410
411
                 ok = symmetrical(A, n) . AND. positive_definite(A, n)
412
                 return
```

```
413
414
           end function
415
416
           function PLU_cond(A, n) result (ok)
417
              implicit none
418
419
              integer :: n
420
              double precision A(n, n)
421
422
              integer :: i, j
423
              double precision :: s
424
425
              logical :: ok
426
427
              do j = 1, n
428
                  s = 0.0D0
429
                  do i = 1, j
430
                     if (A(i, j) > s) then
431
                         s = A(i, j)
432
                      end if
433
                  end do
434
              end do
435
              ok = (s < 0.01D0)
436
437
438
              return
439
           end function
440
441
           function LU_cond(A, n) result (ok)
442
              implicit none
443
444
              integer :: n
445
              double precision A(n, n)
446
447
              logical :: ok
448
449
              ok = positive_definite(A, n)
450
451
              return
452
           end function
                453
454
455
           1 1
456
           457
           458
           _____
459
460
461
          ====== Matrix Factorization Methods =======
462
           function PLU_decomp(A, P, L, U, n) result (ok)
463
              implicit none
464
465
              integer :: n
```

```
466
                 double precision :: A(n,n), P(n,n), L(n,n), U(n,n)
467
468
                 logical :: ok
469
470
                 Permutation Matrix
471
                 P = pivot_matrix(A, n)
472
473
                 Decomposition over Row-Swapped Matrix
474
                 ok = LU_decomp(matmul(P, A), L, U, n)
475
                 return
476
             end function
477
478
             function LU_decomp(A, L, U, n) result (ok)
479
                 implicit none
480
481
                 integer :: n
482
                 double precision :: A(n, n), L(n, n), U(n,n), M(n, n)
483
484
                 logical :: ok
485
486
                 integer :: i, j, k
487
488
                 Results Matrix
489
                 M(:, :) = A(:, :)
490
491
                 if (.NOT. LU_cond(A, n)) then
492
                     call ill_cond()
                     ok = .FALSE.
493
494
                     return
495
                 end if
496
497
                 do k = 1, n-1
498
                     do i = k+1, n
499
                         M(i, k) = M(i, k) / M(k, k)
500
                     end do
501
                     do j = k+1, n
502
503
                          do i = k+1, n
504
                              M(i, j) = M(i, j) - M(i, k) * M(k, j)
505
506
                      end do
507
                 end do
508
509
                 Splits M into L & U
510
                 call LU_matrix(M, L, U, n)
511
                 ok = .TRUE.
512
513
                 return
514
             end function
515
516
517
             function Cholesky_decomp(A, L, n) result (ok)
518
                 implicit none
```

```
519
520
                 integer :: n
521
                 double precision :: A(n, n), L(n, n)
522
523
                 logical :: ok
524
525
                 integer :: i, j
526
527
                 if (.NOT. Cholesky_cond(A, n)) then
528
                     call ill_cond()
529
                     ok = .FALSE.
530
                     return
531
                 end if
532
533
                 do i = 1, n
534
                     L(i, i) = sqrt(A(i, i) - sum(L(i, :i-1) * L(i, :i-1)))
535
                     do j = 1 + 1, n
                          L(j, i) = (A(i, j) - sum(L(i, :i-1) * L(j, :i-1)))
536
                             / L(i, i)
537
                     end do
538
                 end do
539
540
                 ok = .TRUE.
541
                 return
542
             end function
543
544
             function Jacobi_cond(A, n) result (ok)
545
                 implicit none
546
547
                 integer :: n
548
549
                 double precision :: A(n, n)
550
551
                 logical :: ok
552
553
                 if (.NOT. spectral_radius(A, n) < 1.0D0) then</pre>
554
                     ok = .FALSE.
555
                     call ill_cond()
556
                     return
557
                 else
                     ok = .TRUE.
558
559
                     return
560
                 end if
561
             end function
562
563
             function Jacobi(A, x, b, e, n) result (ok)
564
                 implicit none
565
566
                 integer :: n
567
568
                 double precision :: A(n, n)
569
                 double precision :: b(n), x(n), x0(n)
570
                 double precision :: e
```

```
571
572
                 logical :: ok
573
574
                 integer :: i, k
575
576
                 x0 = rand_vector(n)
577
578
                 ok = Jacobi_cond(A, n)
579
580
                 if (.NOT. ok) then
581
                     return
582
                 end if
583
584
                 do k = 1, KMAX
585
                     do i = 1, n
586
                         x(i) = (b(i) - dot_product(A(i, :), x0)) / A(i, i)
587
                     end do
588
                     x0(:) = x(:)
589
                     e = vector_norm(matmul(A, x) - b, n)
590
                     if (e < TOL) then
591
                          return
592
                     end if
593
594
                 call error ('Erro: Esse método não convergiu.')
595
                 ok = .FALSE.
596
                 return
597
             end function
598
599
             function Gauss_Seidel_cond(A, n) result (ok)
600
                 implicit none
601
602
                 integer :: n
603
604
                 double precision :: A(n, n)
605
606
                 logical :: ok
607
608
                 integer :: i
609
                 do i = 1, n
610
611
                     if (A(i, i) == 0.0D0) then
612
                          ok = .FALSE.
613
                          call ill_cond()
614
                          return
615
                      end if
616
                 end do
617
618
                 if (symmetrical(A, n) .AND. positive_definite(A, n)) then
619
                     ok = .TRUE.
620
                     return
621
                 else
622
                     call warn('Aviso: Esse método pode não convergir.')
623
                     return
```

```
624
                 end if
625
             end function
626
627
             function Gauss_Seidel(A, x, b, e, n) result (ok)
628
                 implicit none
629
630
                 integer :: n
631
632
                 double precision :: A(n, n)
633
                 double precision :: b(n), x(n)
634
                 double precision :: e, s
635
636
                 logical :: ok
637
                 integer :: i, j, k
638
639
                 ok = Gauss_Seidel_cond(A, n)
640
                 if (.NOT. ok) then
641
642
                     return
643
                 end if
644
645
                 do k = 1, KMAX
646
                      do i = 1, n
647
                          s = 0.0D0
648
                          do j = 1, n
649
                              if (i /= j) then
650
                                   s = s + A(i, j) * x(j)
651
                              end if
652
                          end do
                          x(i) = (b(i) - s) / A(i, i)
653
654
                      end do
655
                      e = vector_norm(matmul(A, x) - b, n)
656
                      if (e < TOL) then</pre>
657
                          return
658
                      end if
659
                 end do
660
                 call error ('Erro: Esse método não convergiu.')
661
                 ok = .FALSE.
662
                 return
663
             end function
664
665
             Decomposição LU e afins
666
667
             subroutine LU_backsub(L, U, x, y, b, n)
668
                 implicit none
669
670
                 integer :: n
671
672
                 double precision :: L(n, n), U(n, n)
673
                 double precision :: b(n), x(n), y(n)
674
675
                 integer :: i
676
```

```
677
                 Ly = b (Forward Substitution)
678
                 do i = 1, n
679
                     y(i) = (b(i) - SUM(L(i, 1:i-1) * y(1:i-1))) / L(i, i)
680
                 end do
681
682
                 Ux = y (Backsubstitution)
683
                 do i = n, 1, -1
684
                     x(i) = (y(i) - SUM(U(i,i+1:n) * x(i+1:n))) / U(i, i)
685
                 end do
686
687
             end subroutine
688
689
             function LU_solve(A, x, y, b, n) result (ok)
690
                 implicit none
691
692
                 integer :: n
693
694
                 double precision :: A(n, n), L(n, n), U(n, n)
695
                 double precision :: b(n), x(n), y(n)
696
697
                 logical :: ok
698
699
                 ok = LU_decomp(A, L, U, n)
700
701
                 if (.NOT. ok) then
702
                     return
703
                 end if
704
705
                 call LU_backsub(L, U, x, y, b, n)
706
707
                 return
708
             end function
709
             function PLU_solve(A, x, y, b, n) result (ok)
710
711
                 implicit none
712
713
                 integer :: n
714
715
                 double precision :: A(n, n), P(n,n), L(n, n), U(n, n)
716
                 double precision :: b(n), x(n), y(n)
717
718
                 logical :: ok
719
720
                 ok = PLU_decomp(A, P, L, U, n)
721
                 if (.NOT. ok) then
722
723
                     return
724
                 end if
725
726
                 call LU_backsub(L, U, x, y, matmul(P, b), n)
727
728
                 x(:) = matmul(P, x)
729
```

```
730
              return
731
           end function
732
733
           function Cholesky_solve(A, x, y, b, n) result (ok)
734
               implicit none
735
736
              integer :: n
737
738
              double precision :: A(n, n), L(n, n), U(n, n)
739
              double precision :: b(n), x(n), y(n)
740
741
              logical :: ok
742
743
              ok = Cholesky_decomp(A, L, n)
744
745
              if (.NOT. ok) then
746
                  return
747
              end if
748
749
              U = transpose(L)
750
              call LU_backsub(L, U, x, y, b, n)
751
752
753
              return
754
           end function
755
756
                757
                                          ) |
758
759
           | | | ____ | | | / /__
760 !
           761
762
   !
           _____
763
           ======= Power Method =======
764
           function power_method(A, n, x, 1) result (ok)
765
766
              implicit none
767
              integer :: n
768
              integer :: k = 0
769
770
              double precision :: A(n, n)
771
              double precision :: x(n)
772
              double precision :: 1, 11
773
774
              logical :: ok
775
776
              Begin with random normal vector and set 1st component to
      zero
777
              x(:) = rand_vector(n)
              x(1) = 1.0D0
778
779
780 !
              Initialize Eigenvalues
781
              1 = 0.0D0
```

```
782
783
                 Checks if error tolerance was reached
784
                 do while (k < MAX_ITER)</pre>
785
                     11 = 1
786
787
                     x(:) = matmul(A, x)
788
789
                     Retrieve Eigenvalue
790
                     1 = x(1)
791
792
                     Retrieve Eigenvector
793
                     x(:) = x(:) / 1
794
795
                     if (dabs((1-11) / 1) < TOL) then
796
                          ok = .TRUE.
797
                          return
798
                      else
799
                          k = k + 1
800
                          continue
801
                      end if
802
                 end do
803
                 ok = .FALSE.
804
                 return
805
             end function
806
807
             function Jacobi_eigen(A, n, L, X) result (ok)
808
                 implicit none
809
                 integer :: n, i, j, u, v
810
                 integer :: k = 0
811
812
                 double precision :: A(n, n), L(n, n), X(n, n), P(n, n)
813
                 double precision :: y, z
814
815
                 logical :: ok
816
817
                 X(:, :) = id_matrix(n)
818
                 L(:, :) = A(:, :)
819
820
                 do while (k < MAX_ITER)</pre>
821
                     z = 0.0D0
                     do i = 1, n
822
823
                          do j = 1, i - 1
824
                              y = DABS(L(i, j))
825
826
                              Found new maximum absolute value
827
                              if (y > z) then
                                  u = i
828
829
                                   v = j
830
                                   z = y
831
                              end if
832
                          end do
833
                      end do
834
```

```
if (z \ge TOL) then
835
836
                         P(:, :) = given_matrix(L, n, u, v)
837
                         L(:, :) = matmul(matmul(transpose(P), L), P)
838
                         X(:, :) = matmul(X, P)
839
                         k = k + 1
840
                     else
                         ok = .TRUE.
841
842
                         return
843
                     end if
844
                 end do
                 ok = .FALSE.
845
846
                 return
847
             end function
848
849
                   |____|/
| | | (___ | | | / \
| | \___ \ | | | //\
850
851
                                                  /_ \
852
             | | ____ | | _ ___ \
853
             854
855
856
857
            function least_squares(x, y, s, n) result (ok)
858
                 implicit none
                 {\tt integer} \; :: \; {\tt n}
859
860
861
                 logical :: ok
862
863
                 double precision :: A(2,2), b(2), s(2), r(2), x(n), y(n)
864
865
                 A(1, 1) = n
                 A(1, 2) = SUM(x)
866
867
                 A(2, 1) = SUM(x)
868
                 A(2, 2) = dot_product(x, x)
869
                 b(1) = SUM(y)
870
871
                 b(2) = dot_product(x, y)
872
873
                 ok = Cholesky_solve(A, s, r, b, n)
874
                 return
875
             end function
876
877
        end module Matrix
```