Calculo numérico de autovalores.

Exercício Computacional
MAP3122 - Quadrimestral 2019
Prof. Antoine Laurain

Esse exercício computacional é **individual**. Veja as instruções detalhadas no final do texto.

1 Sistemas de vibração

1.1 Um sistema de vibração de duas massas

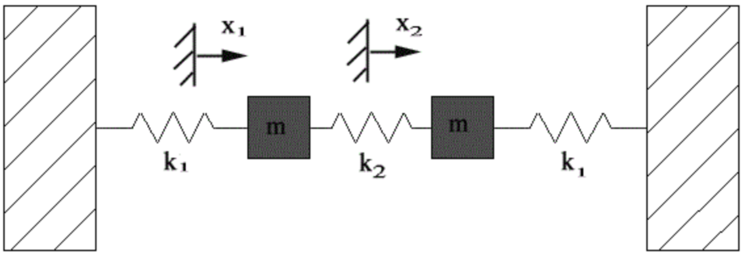

Figura 1: Um sistema de vibração de duas massas

Considere o sistema na figura 1 com duas massas e três molas. As massas são limitadas a se mover apenas na direção horizontal (elas não podem se mover para cima e para baixo). As equações de movimento para esse problema são (verifique!)

$$m\ddot{x}_1 + (k_1 + k_2)x_1 - k_2 x_2 = 0,$$
$$m\ddot{x}_2 + (k_1 + k_2)x_2 - k_2 x_1 = 0.$$

Aqui k_1 e k_2 são as rigidezes das molas e as duas massas são iguais à m. Podemos reorganizar essas equações na forma matricial seguinte:

$$\ddot{x} = Ax, \tag{1}$$

onde

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} -\beta & \alpha \\ \alpha & -\beta \end{pmatrix}, \qquad \beta = \frac{k_1 + k_2}{m}, \quad \alpha = \frac{k_2}{m}.$$

Procuramos soluções da forma

$$x(t) = ve^{i\omega t},$$

onde $v \in \mathbb{R}^2$ é um vetor, $\omega \in \mathbb{R}$ é a frequência, e i denota o i complexo. Substituindo $x(t) = ve^{i\omega t}$ em (1) obtemos a equação

$$\ddot{x} = -\omega^2 ve^{i\omega t} = -\omega^2 x(t) = Ax(t).$$

Assim, introduzindo $\lambda = -\omega^2$, obtivemos o problema de autovalor

$$Ax = \lambda x.$$

Observe que A é simétrica, o que implica que os autovalores de A são reais.

Para calcular os autovalores de A, vamos calcular as raízes do polinômio característico $p(\lambda)$. Denotando $I_2 \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ a matriz identidade, calculamos

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I_2) = (-\lambda - \beta)^2 - \alpha^2.$$

As duas raízes de $p(\lambda)$ são $\lambda_1 = -\beta - \alpha$ e $\lambda_2 = -\beta + \alpha$, que são tambem os dois autovalores de A. Para simplificar a notação, vamos escolher o caso particular $k_1 = k_2 = m = 1$. Obtemos $\alpha = 1$, $\beta = 2$, $\lambda_1 = -3$, $\lambda_2 = -1$.

Agora vamos calcular os autovetores v_1, v_2 associados a λ_1, λ_2. O autovetor v_k é solução do sistema linear

$$(A - \lambda_k I_2)v_k = 0, \quad k = 1, 2.$$

Observe, no entanto, que esse sistema linear não tem solução única desde que $\det(A - \lambda_k I_2) = 0$. Por exemplo, para $k = 1$, obtemos

$$(A - \lambda_1 I_2)v_1 = \begin{pmatrix} -\beta - \lambda_1 & \alpha \\ \alpha & -\beta - \lambda_1 \end{pmatrix} v_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1,1} \\ v_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Assim, temos duas vezes a mesma equação $v_{1,1} + v_{1,2} = 0$. Isso significa que uma componente de v_1 pode ser escolhida arbitrariamente, por exemplo $v_{1,1} = 1$, o que implica $v_{1,2} = -1$. Então o autovetor associado ao autovalor $\lambda_1 = -3$ é

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Da mesma maneira, calculamos o outro autovetor

$$v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Observando que $x(t) = ve^{-i\omega t}$ também é solução de (1), obtemos todas as soluções de (1) na forma geral

$$x(t) = c_1 v_1 e^{i\omega_1 t} + c_2 v_1 e^{-i\omega_1 t} + c_3 v_2 e^{i\omega_2 t} + c_4 v_2 e^{-i\omega_2 t},$$

com $\omega_1 = \sqrt{-\lambda_1} = \sqrt{3}$ e $\omega_2 = \sqrt{-\lambda_2} = 1$. Aqui os c_k, $k = 1, 2, 3, 4$, são coeficientes complexos. Para obter soluções reais, os coeficientes c_1 e c_2 devem ser conjugados complexos um do outro, assim como c_3 e c_4.

Consequentemente, obtemos as soluções reais de (1) na forma

$$x(t) = \gamma_1 v_1 \cos(\omega_1 t) + \gamma_3 v_1 \sin(\omega_1 t) + \gamma_2 v_2 \cos(\omega_2 t) + \gamma_4 v_2 \sin(\omega_2 t).$$

Para obter os coeficientes $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$, precisamos de condições iniciais para a posição $x(0)$ e a velocidade $\dot{x}(0)$. Vamos considerar o caso onde a velocidade inicial é nula, i.e. $\dot{x}(0) = (0, 0)^\mathsf{T}$. Obtemos

$$\dot{x}(0) = \omega_1 \gamma_3 v_1 + \omega_2 \gamma_4 v_2 = \omega_1 \gamma_3 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \omega_2 \gamma_4 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

que leva ao conjunto de equações

$$\begin{aligned} \omega_1 \gamma_3 + \omega_2 \gamma_4 &= 0, \\ -\omega_1 \gamma_3 + \omega_2 \gamma_4 &= 0, \end{aligned}$$

cuja única solução é $\gamma_3 = \gamma_4 = 0$. Consequentemente, quando a velocidade inicial é nula a solução é da forma

$$x(t) = \gamma_1 v_1 \cos(\omega_1 t) + \gamma_2 v_2 \cos(\omega_2 t). \tag{2}$$

Agora consideramos uma posição inicial $x(0) = (p_1, p_2)^\mathsf{T}$, obtemos

$$x(0) = \gamma_1 v_1 + \gamma_2 v_2 = V \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

onde $V \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ é a matriz cujas colunas são os autovetores v_1, v_2, isto é

$$V = \begin{pmatrix} v_{1,1} & v_{2,1} \\ v_{1,2} & v_{2,2} \end{pmatrix}.$$

Assim, os coeficientes γ_1, γ_2 são dados por

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = V^{-1} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}.$$

Os *modos* de $x(t)$ são as partes de $x(t)$ que têm as mesmas frequências. Por exemplo em (2), chamamos $\gamma_1 v_1 \cos(\omega_1 t)$ de primeiro modo de $x(t)$ e $\gamma_2 v_2 \cos(\omega_2 t)$ de segundo modo de $x(t)$.

Dependendo das condições iniciais (p_1, p_2), o sistema vai vibrar numa combinação desses dois modos. Por exemplo, é interessante observar que se escolhermos (p_1, p_2) como um múltiplo do autovetor v_1, o sistema vai vibrar apenas no primeiro modo. De fato, é fácil de ver que se por exemplo $(p_1, p_2) = v_1$, a solução de (3) será $(\gamma_1, \gamma_2) = (1, 0)$, o que implica $x(t) = v_1 \cos(\omega_1 t)$. Assim, o sistema vai vibrar apenas no primeiro modo e as duas massas se movem juntas em fase (e a mola interna não tem efeito). Da mesma maneira, se $(p_1, p_2) = v_1$, o sistema vai vibrar apenas no segundo modo. Se você tentar condições iniciais próximas, sem serem iguais, de um dos modos, (por exemplo, $x_1(0) = 0,9$ e $x_2(0) = 1$), você obterá movimento próximo àquele modo sozinho. Para outras condições iniciais (por exemplo, $x_1(0) = 0$ e $x_2(0) = 1$), alguns movimentos complicados podem resultar, mas o movimento é sempre apenas a combinação linear dos dois modos do sistema.

1.2 Sistemas de ordem n

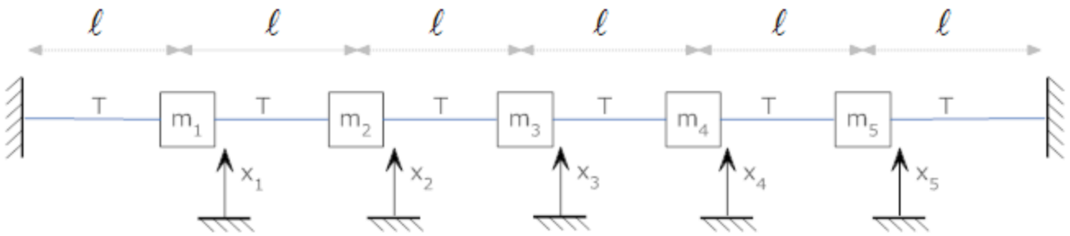

Figura 2: Um sistema de vibração de cinco massas

Vamos discutir um sistema dinâmico que consiste de $n = 5$ massas em uma corda que está sob tensão uniforme T. Cada massa m_i tem uma posição associada x_i que é zero no equilíbrio. As massas são igualmente espaçadas a uma distância ℓ umas das outras; ver figura 2. Para desenvolver as equações de movimento, considere o caso quando as massas são deslocadas do equilíbrio; ver figura 3.

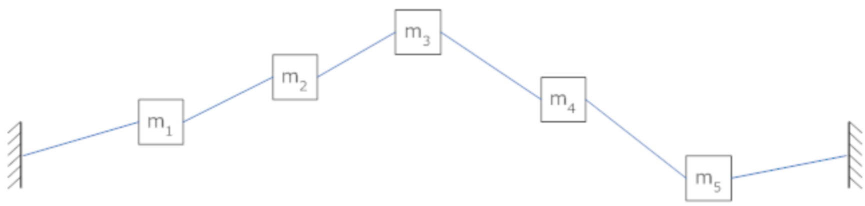

Figura 3: Um sistema de vibração de cinco massas

Agora vamos examinar m_1 de perto para podermos escrever sua equação de movimento. A força de cada corda na direção vertical é dada pela tensão multiplicada pelo seno do ângulo entre a massa e a corda; ver figura 4. Há também uma força inercial, então obtemos a equação diferencial

$$m_1 \ddot{x}_1 + T \sin(\theta_1) - T \sin(\theta_2) = 0.$$

Se assumirmos que a largura das massas, bem como o seu deslocamento vertical, são pequenas em comparação com a distância ℓ, então $\sin(\theta_1) \approx x_1/\ell$ e obtemos a equação

$$m_1 \ddot{x}_1 + T \frac{x_1}{\ell} - T \frac{x_2 - x_1}{\ell} = 0.$$

Reorganizando a equação, obtemos

$$\ddot{x}_1 = -2 \frac{T}{m_1 \ell} x_1 + \frac{T}{m_1 \ell} x_2.$$

Da mesma forma, considerando que m_2 é conectado com m_1 e m_3, a equação de movimento para m_2 é

$$\ddot{x}_2 = \frac{T}{m_2\ell}x_1 - 2\frac{T}{m_2\ell}x_2 + \frac{T}{m_2\ell}x_3.$$

Depois de escrever as equações de movimentos para as outras massas, obtemos o sistema $\ddot{x} = Ax$ com

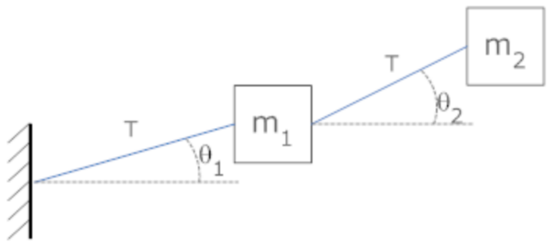

Figura 4: Um sistema de vibração de cinco massas

$$A = \begin{pmatrix} -2\alpha_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2 & -2\alpha_2 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3 & -2\alpha_3 & \alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_4 & -2\alpha_4 & \alpha_4 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_5 & -2\alpha_5 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

onde $\alpha_i = \frac{T}{m_i\ell}$.

1.3 Tarefas computacionais

Para $n = 2$, os autovalores λ_1, λ_2 podem ser calculados explicitamente porque o polinômio característico é de grau 2. A partir de $n \geq 3$, o cálculo explícito dos autovalores é dificil ou impossivel, mas podemos sempre calcular uma aproximação numérica dos autovalores. As soluções numéricas podem ser visualizadas para diferentes condições iniciais na página:
`http://lpsa.swarthmore.edu/MtrxVibe/MatrixAll.html#Intro`.

1. Calcule os autovalores e autovetores da matriz A dada por (4) usando o método QR descrito na seção 2 no caso $m_k = 1$ para todos $k = 1, 2, 3, 4, 5$, e tambem com $T = \ell = 1$. Os autovetores devem ser *normalizados*, o que significa que seu algoritmo deve fornecer os autovetores v com a propriedade $\|v\|^2 = \sum_{k=1}^{2} v_k^2 = 1$.

2. No seu relatório, escreva a forma geral da solução $x(t)$ de $\ddot{x} = Ax$ usando esses autovalores e autovetores com a velocidade inicial nula, isto é $\dot{x}(0) = (0, 0, 0, 0, 0)^{\mathsf{T}}$. (Use apenas as notações λ_k e v_k para escrever a forma geral da solução $x(t)$, não use os valores numéricos para escrever a solução).

3. Estude as simetrias e antissimetrias dos autovetores em relação à posição da massa do meio. O que acontece quando começamos com uma posição inicial das massas simétrica em relação à posição da massa do meio? E quando começamos com uma posição inicial antissimétrica?

4. Considere a matriz seguinte

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -11 & 10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & -11 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

   Explique como essa matriz pode ser interpretada como a matriz dum sistema $\ddot{x} = Ax$ para um sistema de ordem n semelhante ao sistema apresentado na seção 1.2. Calcule os autovalores e autovetores normalizados da matriz A dada por (5) usando o método QR descrito na seção 2. Escreve a forma geral da solução $x(t)$ de $\ddot{x} = Ax$ usando esses autovalores e autovetores com a velocidade inicial nula. Interprete o resultado do ponto de vista da física (em termos de frequência).

2 Fatoração QR de matrizes

Para calcular os autovalores de $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, usaremos a fatoração QR tal que $A = QR$, onde Q é uma matriz ortogonal e R é uma matriz triangular superior. Desenvolveremos aqui esse método de fatoração QR de matrizes $n \times n$, através de transformações de Householder.

2.1 Algumas notações

Dado um vetor $u \in \mathbb{R}^n$, usamos a convenção que ele é um vetor coluna, isto significa que u é identificado a uma matriz de $\mathbb{R}^{n\times 1}$, i.e. uma matriz com n linhas e uma coluna. Assim, o transposto u^T é uma matriz de $\mathbb{R}^{1\times n}$, i.e. uma matriz com n colunas e uma linha. Dados dois vetores u, v de $\mathbb{R}^n$, o produto uv^T segue a regra de cálculo matricial de uma matriz $\mathbb{R}^{n\times 1}$ com uma matriz de $\mathbb{R}^{1\times n}$, então $uv^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é uma matriz quadrada. O produto uv^T tambem é chamado *produto externo* ou *produto tensorial* de u e v e às vezes é notado $u \otimes v$.

O produto escalar (ou produto *interno*) de dois vetores u, v de $\mathbb{R}^n$ é denotado $u \cdot v$ e definido por:

$$u \cdot v = u^\mathsf{T} v = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i.$$

2.2 Autovalores e autovetores

Dado uma matriz quadrada $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, dizemos que $\lambda \in \mathbb{C}$ é um *autovalor* de A se existir um vetor $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$, tal que $Ax = \lambda x$. Nesse caso chamamos x de *autovetor* associado ao autovalor λ. Observe que apesar de A ter suas entradas todas reais, os autovalores e autovetores de A podem ser complexos.

O problema de autovalor pode ser escrito como $Ax - \lambda x = (A - \lambda I_n)x = 0$ onde $I_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é a matriz identidade. Como $x \neq 0$, essa equação tem soluções apenas se

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I_n) = 0. \tag{6}$$

De fato, podemos mostrar que os autovalores de A são exatamente as soluções de (6) em $\mathbb{C}$. Observa que $p(\lambda)$ é um polinômio de grau n na variável λ, então pelo teorema fundamental da álgebra, a equação $p(\lambda) = 0$ tem n raízes em $\mathbb{C}$. Então A tem n autovalores em $\mathbb{C}$. O polinômio $p(\lambda)$ se chama polinômio característico. Observe, entretanto, que alguns autovalores podem ter o mesmo valor. Por exemplo, todos os autovalores de I_n valem 1.

Uma propriedade importante que usaremos neste exercício computacional é a seguinte: os autovalores e autovetores de matrizes simétricas são reais, isto é $\lambda \in \mathbb{R}$ e $x \in \mathbb{R}^n$.

2.3 Transformações de Householder

Dado $v \in \mathbb{R}^n$ definimos a transformação de Householder $H_v : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ dada por $H_v = I_n - 2\frac{vv^\mathsf{T}}{v\cdot v}$ (onde I_n é a identidade), que a cada $x \in \mathbb{R}^n$ associa $H_v x = x - 2\frac{v\cdot x}{v\cdot v}v$. Esta transformação determina a reflexão do vetor x em relação ao espaço $v^\perp$. A transformação linear H_v é ortogonal e simétrica, ou seja, $(H_v)^{-1} = H_v^\mathsf{T} = H_v$. De fato, temos:

$$\begin{aligned} H_v^\mathsf{T} &= \left(I_n - 2\frac{vv^\mathsf{T}}{v\cdot v}\right)^\mathsf{T} = I_n - 2\frac{(vv^\mathsf{T})^\mathsf{T}}{v\cdot v} = H_v, \\ H_v^\mathsf{T} H_v^\mathsf{T} &= \left(I_n - 2\frac{vv^\mathsf{T}}{v\cdot v}\right)\left(I_n - 2\frac{vv^\mathsf{T}}{v\cdot v}\right) = I_n - 4\frac{vv^\mathsf{T}}{v\cdot v} + 4\frac{(vv^\mathsf{T})(vv^\mathsf{T})}{(v\cdot v)^2} = I_n. \end{aligned}$$

Observemos ainda que uma transformação ortogonal preserva a norma de um vetor, ou seja

$$\|H_v u\|^2 = H_v u \cdot H_v u = (H_v u)^\mathsf{T} H_v u = u^\mathsf{T} H_v H_v u = u^\mathsf{T} I_n u = u^\mathsf{T} u = \|u\|^2.$$

Dados dois vetores x, y não nulos em $\mathbb{R}^n$, podemos definir uma transformação de Householder tal que $H_v x = \lambda y$ com $\lambda \in \mathbb{R}$. Para tanto basta tomarmos $v = x + \alpha y$, onde $\alpha = \pm\frac{\|x\|}{\|y\|}$ (verifique!).

Exemplo 1. *Consideremos x e y em $\mathbb{R}^3$, com $x^\mathsf{T} = (1, 1, 0)$ e $y^\mathsf{T} = (0, -1, 1)$. Definindo $v = x + y$, calculamos $v^\mathsf{T} = (1, 0, 1)$ e*

$$H_v x = x - 2\frac{v\cdot x}{v\cdot v}v = x - v = -y.$$

Note que nesse exemplo, para o cálculo de $H_v x$ não necessitamos da representação matricial da transformação H_v, bastando calcular os produtos escalares de v por x e de v por v e depois adicionar dois vetores. Poderíamos escrever a matriz que representa $H_v : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ como

$$H_v = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

e então multiplicar pelo vetor x. Isto não só é desnecessário, como seria computacionalmente bem mais ineficiente (teríamos $O(n^2)$ multiplicações na montagem de H_v e também no cálculo de $H_v x$ ao multiplicar a matriz pelo vetor, enquanto que o cálculo dos produtos internos e a soma dos vetores envolve apenas $O(n)$ operações).

2.4 Fatoração QR

Agora iremos mostrar como transformar uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ em uma matriz $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ triangular superior, i.e. com $R_{ij} = 0$ para $i > j$, através de sucessivas transformações de Householder. Ou seja, vamos definir as matrizes de transformação $H_{v_1}, H_{v_2}, \ldots, H_{v_{n-1}}$, tais que $H_{v_{n-1}} \ldots H_{v_2} H_{v_1} A = R$ e portanto, como as transformações de Householder são ortogonais e simétricas, teremos que $A = QR$, com Q ortogonal dada por

$$Q = (H_{v_{n-1}} \ldots H_{v_2} H_{v_1})^\mathsf{T} = H_{v_1} H_{v_2} \ldots H_{v_{n-1}}.$$

Seja $a_1 = (A_{1,1}, A_{2,1}, \ldots, A_{n,1})^\mathsf{T}$ a primeira coluna de A e $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^\mathsf{T}$ o primeiro vetor da base canônica do $\mathbb{R}^n$. Definimos v_1 tal que a transformação H_{v_1} leve o vetor a_1 em um múltiplo de e_1. Isto é feito definindo

$$v_1 = a_1 + \delta \frac{\|a_1\|}{\|e_1\|} e_1 = a_1 + \delta \|a_1\| e_1.$$

Escolheremos o δ nesta expressâo igual ao sinal do primeiro elemento de a_1. Após a aplicação de H_{v_1} à matriz A, obtemos uma matriz da forma

$$H_{v_1} A = \begin{bmatrix} * & * & * & \ldots & * \\ 0 & * & * & \ldots & * \\ 0 & * & * & \ldots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \ldots & * \end{bmatrix}.$$

onde os $*$ representam valores quaisquer e zera-se a primeira coluna abaixo da diagonal principal. Suponha agora que foram executadas $i-1$ etapas do processo e que a nova matriz $\widetilde{A}_{i-1} = H_{v_{i-1}} \ldots H_{v_2} H_{v_1} A$ possua zeros abaixo da diagonal principal em suas primeiras $i-1$ colunas. Vamos agora definir a transformação de Householder H_{v_i} a ser aplicada a seguir. Escolhemos $v_i = a_i + \delta_i \frac{\|a_i\|}{\|e_i\|} e_i = a_i + \delta_i \|a_i\| e_i$, onde $a_i = (0, \ldots, 0, \widetilde{A}_{i,i}, \widetilde{A}_{i+1,i}, \ldots, \widetilde{A}_{n,i})^\mathsf{T}$, e_i é o i-ésimo elemento da base canônica do $\mathbb{R}^n$ e $\delta_i = \operatorname{sgn}(\widetilde{A}_{i,i})$ é o sinal do coeficiente $\widetilde{A}_{i,i}$. Como as primeiras $i-1$ posições do vetor v_i serão nulas a aplicação da transformação H_{v_i} não irá alterar as primeiras $i-1$ linhas da corrente matriz $\widetilde{A}_{i-1}$ e nem as suas primeiras $i-1$ colunas.

Exemplo 2. *Vamos supor que após duas etapas do processo tenhamos chegado à matriz seguinte:*

$$\widetilde{A}_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}.$$

Teríamos então $v_3 = a_3 + \|a_3\| e_3$, com $a_3^\mathsf{T} = (0, 0, 2, -1, 2)$ e $e_3^\mathsf{T} = (0, 0, 1, 0, 0)$. Assim, $v_3^\mathsf{T} = (0, 0, 5, -1, 2)$ e após a aplicação de H_{v_3} à matriz A obteríamos nova matriz (após 3 etapas):

$$\widetilde{A}_3 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -3 & -11/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & 0 & 2/15 & 5/3 \\ 0 & 0 & 0 & 11/15 & 5/3 \end{bmatrix}.$$

Note neste exemplo que nesta etapa só alteramos a submatriz onde tanto $i \geq 3$, como $j \geq 3$ e que o resultado corresponde à aplicação de uma transformação de Houlseholder $H_{\tilde{v}_3}$ de $\mathbb{R}^3$ em $\mathbb{R}^3$ às 3 colunas desta submatriz, com $\tilde{v}_3^\intercal = (5, -1, 2)$ (Faça as contas!). Este é um fato geral. A aplicação da matriz H_{v_k} à matriz $\widetilde{A}_{k-1}$ na k-ésima etapa apenas altera a submatriz onde tanto $i \geq k$, como $j \geq k$. Tal fato pode ser usado na implementação do algoritmo, evitando-se operações desnecessárias. Após as $n-1$ etapas do processo, a matriz A abaixo da diagonal principal estará zerada.

2.5 Calculo de autovalores usando a fatoração QR

Dado $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ e a fatoração $A = QR$, definimos $A_1 = A$, $R_1 = R$ e $Q_1 = Q$. Definimos $A_2 = R_1Q_1$ e procedemos a uma nova fatoração $A_2 = Q_2R_2$. Repetindo este processo, obtemos uma sequência de matriz A_k. Uma vez A_k obtida, calculamos a fatoração $A_k = Q_kR_k$, e definimos $A_{k+1} = R_kQ_k$. Com essa construção obtemos o resultado seguinte.

Teorema 1. *Seja $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ com os autovalores $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n$. Suponhamos que os autovalores satisfazem*

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0.$$

As matrizes A_k definidas acima convergem para uma matriz triangular superior U com entradas diagonais λ_i, $i = 1, \ldots, n$. Se A é simétrico, então U é diagonal tambem.

A prova deste teorema é difícil e não pode ser feita aqui. Na prática, não obtemos a matriz triangular superior U, mas paramos o algoritmo quando k é suficientemente grande, e obtemos uma aproximação $A_k \approx U$. Por exemplo, podemos parar o algoritmo quando todos os coeficientes de A_k abaixo da diagonal são menor que um ε pequeno, escolhido pelo usuário no início. Nesse caso, a matriz A_k é quase triangular superior, no sentido que os coeficientes abaixo da diagonal são pequenos, e os coeficientes na diagonal de A_k são uma boa aproximação dos autovalores de A_k.

Quando as autovalores de A não satisfazem $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$, a convergência do processo descrito acima não é garantida e o método QR pode falhar. Também, quando a diferença de magnitude dos autovalores é pequena, a convergência do método QR pode ser lenta.

Exemplo 3. *Use o método QR para calcular os autovalores de*

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 8 \end{bmatrix}.$$

Solução. O polinômio caraterístico de A é $p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = (5-\lambda)(8-\lambda) - 4$. A duas raízes desse polinômio de ordem 2 são 4 e 9, então os autovalores de A são 4 e 9. Agora vamos calcular as matrizes A_k do método QR e observar que elas convergem para uma matriz diagonal U com os autovalores 4 e 9 na diagonal.

Iteração 1.

$$A_1 = A = \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 8 \end{bmatrix}, \quad Q_1 = Q = \begin{bmatrix} -0.928 & 0.371 \\ 0.371 & 0.928 \end{bmatrix}, \quad R_1 = R = \begin{bmatrix} -5.385 & 4.828 \\ 0 & 6.685 \end{bmatrix}$$

Iteração 2.

$$A_2 = R_1Q_1 = \begin{bmatrix} 6.793 & -2.482 \\ -2.482 & 6.207 \end{bmatrix}, \quad Q_2 = \begin{bmatrix} -0.939 & -0.343 \\ -0.343 & 0.939 \end{bmatrix}, \quad R_2 = \begin{bmatrix} -7.233 & -4.462 \\ 0 & 4.977 \end{bmatrix}$$

Iteração 2.

$$A_3 = R_2Q_2 = \begin{bmatrix} 8.324 & -1.708 \\ -1.708 & 4.675 \end{bmatrix},$$

$\vdots$

Iteração 6.

$$A_6 = R_5Q_5 = \begin{bmatrix} 8.993 & 0.173 \\ 0.173 & 4.006 \end{bmatrix},$$

$\vdots$

Iteração 12.

$$A_{12} = R_{11}Q_{11} = \begin{bmatrix} 8.9999996 & 0.00134 \\ 0.00134 & 4.000018 \end{bmatrix}.$$

Observamos que A_k está convergindo para a matriz diagonal

$$U = \begin{bmatrix} 9 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix},$$

com as entradas na diagonal iguais aos autovalores de A.

2.6 Calculo de autovetores usando a fatoração QR

Na seção anterior, calculamos apenas os autovalores duma matriz A. Se a matriz A for simétrica, podemos tambem calcular os autovetores correspondentes usando o método QR. Na seção 2.5, introduzimos a matriz Q_k que vem da fatoração $A_k = Q_k R_k$. Agora vamos definir uma matriz $V_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$ définida por

$$V_k = Q_1 Q_2 Q_3 \dots Q_k = \prod_{i=1}^{k} Q_i.$$

Podemos mostrar que a matriz V_k é ortogonal e que V_k se aproxima de V quando $k \to \infty$, onde V é uma matriz ortogonal. Se a matriz A for simétrica, então as colunas de V são os autovetores de A. A ordem dos autovetores corresponde a ordem dos autovalores na diagonal da matriz U.

Num algoritmo numérico, atualizamos V_k em cada iteração usando a propriedade $V_k = V_{k-1} Q_k$. Assim, para k suficientemente grande, obtemos uma aproximação dos autovetores.

2.7 Tarefas computacionais

Testes Iniciais

- Consideremos a matriz simétrica

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 0 \\ 4 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

  Calcule o valor exato dos autovalores de A usando o polinômio caractéristico. Calcule também o valor exato dos autovetores de A resolvendo os sistemas lineares $(A - \lambda_k I)x = 0$ para $k = 1, 2, 3$ (Observe que temos $\det(A - \lambda_k I) = 0$, pois $x \neq 0$, então esse sistema linear têm apenas duas equações independentes, e por isso tem uma infinidade de soluções x. Uma solução única pode ser obtida escolhando uma normalização). Os autovetores v_k devem ser normalizados, i.e. eles devem satisfazer $\|v_k\| = 1$. Depois, calcule uma aproximação numérica dos autovalores e autovetores de A usando o método QR. Verifique a convergência para os autovetores e autovalores calculados explicitamente. Para a comparação, é importante que todos os autovetores sejam normalizados.

- Consideremos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

  Calcule o valor exato dos autovalores de A usando o polinômio caractéristico. Depois, calcule uma aproximação numérica dos autovalores de A usando o método QR. Verifique a convergência para os autovalores calculados explicitamente. Como a matriz A não é simétrica, não podemos aproximar os autovetores de A usando a matriz V_k da seção (2.6).

- Consideremos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -3 & 1 \end{bmatrix}.$$

  Calcule os autovalores de A usando o polinômio caractéristico. Depois, calcule os autovalores de A usando o método QR. O que acontece? Explique o comportamento do algoritmo para essa matriz. Como a matriz A não é simétrica, não podemos aproximar os autovetores de A usando a matriz V_k da seção (2.6).

- Consideremos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 0.33333 & 5 \end{bmatrix}$$

  Calcule os autovalores de A usando o polinômio caractéristico. Depois, calcule os autovalores de A usando o método QR. O que acontece? Explique o comportamento do algoritmo para essa matriz (você também pode comparar com os resultados obtidos por outros pacotes para computação de autovalores). Como a matriz A não é simétrica, não podemos aproximar os autovetores de A usando a matriz V_k da seção (2.6).

Instruções

As análises e resultados obtidos devem ser organizados em um relatório que deve minimamente discutir os problemas estudados e os resultados obtidos.

- **O exercício é individual.**
- O exercício deve ser feito em linguagem C ou Python.
- O uso de bibliotecas **não é permitido** (por exemplo para realizar as operações entre matrizes). A única exceção é que funções que permitem a representação de matrizes são permitidas (por exemplo, a função numpy.array).
- A entrega deve conter o relatório (em .pdf), contendo a análise do problema estudado, e o código usado para as simulações computacionais (arquivos .c ou .py). A entrega deve ser feita em um arquivo compactado único.
- O uso de LaTeX para escrever o relatório é **fortemente incentivado.**

O seu código deve estar bem comentado e estruturado. A entrada e saída devem ser feitas de forma a ajudar o usuário a executar o programa e deve facilitar a análise dos resultados. Inclua qualquer arquivo adicional necessário para o seu programa no arquivo compactado a ser entregue. Se o seu programa precisa de arquivos de entrada, considere que os mesmos encontram-se na mesma pasta do executável, ou solicite o caminho/nome do arquivo ao usuário.

Você deve resolver tanto os exercícios relativos à aplicação, descritos na parte de sistemas de vibração, quanto os testes descritos na seção anterior de Testes Iniciais.