Influência da Variação do Espectro em Computação Científica

Fermín S. V. Bazán

e-mail: fermin@mtm.ufsc.br

http://www.mtm.ufsc.br/˜fermin

CFM-UFSC

Universidade Federal de Santa Catarina

Novembro – 2005

Resumo

I. Algumas generalidades sobre Computação Científica e Espectro

II. Alguns Modelos Matemáticos

III. Variação do Espectro (Olhar crítico).

- △ Raízes de polinômios (Teoria e exemplos)
- △ Espectro de matrizes não normais e medidas de não normalidade (Teoria e exemplos)
- △ Métodos Iterativos e Não Normalidade

IV. Algumas Conclusões

I. Generalidades Sobre Computação Científica

- **Missão:** Resolver, entre outros (Golub e Ortega, 1992, P. C. Hansen, 1996, Trefethen 2000, 2005)
  - Modelos matemáticos provenientes das ciências puras e aplicadas (EDP's, EDO's, Sistemas Lineares, Problemas de Autovalor, etc)
  - Problemas em Otimização (Minimização de Funcionais, Solução de Sistemas de Equações Não Lineares, etc)
  - ?
- **Alguns Subsídios:**
  - Teoria e métodos: Cálculo, Métodos Numéricos, Análise Numérica, Análise Funcional, etc
  - Ferramentas Computacionais: Computadores de última geração, Linguagens de Programação, Pacotes Computacionais (MATLAB, MATHEMATICA, etc)

Obs. Computação Científica $\neq$ Ciências da Computação

I. Generalidades Sobre Computação Científica

- **Missão:** Resolver, entre outros (Golub e Ortega, 1992, P. C. Hansen, 1996, Trefethen 2000, 2005)
  - Modelos matemáticos provenientes das ciências puras e aplicadas (EDP's, EDO's, Sistemas Lineares, Problemas de Autovalor, etc)
  - Problemas em Otimização (Minimização de Funcionais, Solução de Sistemas de Equações Não Lineares, etc)
  - ?
- **Alguns Subsídios:**
  - Teoria e métodos: Cálculo, Métodos Numéricos, Análise Numérica, Análise Funcional, etc
  - Ferramentas Computacionais: Computadores de última geração, Linguagens de Programação, Pacotes Computacionais (MATLAB, MATHEMATICA, etc)

Obs. Computação Científica $\neq$ Ciências da Computação

I. Generalidades Sobre Computação Científica

- **Missão:** Resolver, entre outros (Golub e Ortega, 1992, P. C. Hansen, 1996, Trefethen 2000, 2005)
  - Modelos matemáticos provenientes das ciências puras e aplicadas (EDP's, EDO's, Sistemas Lineares, Problemas de Autovalor, etc)
  - Problemas em Otimização (Minimização de Funcionais, Solução de Sistemas de Equações Não Lineares, etc)
  - ?
- **Alguns Subsídios:**
  - Teoria e métodos: Cálculo, Métodos Numéricos, Análise Numérica, Análise Funcional, etc
  - Ferramentas Computacionais: Computadores de última geração, Linguagens de Programação, Pacotes Computacionais (MATLAB, MATHEMATICA, etc)

Obs. Computação Científica $\neq$ Ciências da Computação

I. Generalidades Sobre Computação Científica

- **Missão:** Resolver, entre outros (Golub e Ortega, 1992, P. C. Hansen, 1996, Trefethen 2000, 2005)
  - Modelos matemáticos provenientes das ciências puras e aplicadas (EDP's, EDO's, Sistemas Lineares, Problemas de Autovalor, etc)
  - Problemas em Otimização (Minimização de Funcionais, Solução de Sistemas de Equações Não Lineares, etc)
  - ?
- **Alguns Subsídios:**
  - Teoria e métodos: Cálculo, Métodos Numéricos, Análise Numérica, Análise Funcional, etc
  - Ferramentas Computacionais: Computadores de última geração, Linguagens de Programação, Pacotes Computacionais (MATLAB, MATHEMATICA, etc)

Obs. Computação Científica $\neq$ Ciências da Computação

I. Generalidades Sobre Computação Científica

- **Missão:** Resolver, entre outros (Golub e Ortega, 1992, P. C. Hansen, 1996, Trefethen 2000, 2005)
  - Modelos matemáticos provenientes das ciências puras e aplicadas (EDP's, EDO's, Sistemas Lineares, Problemas de Autovalor, etc)
  - Problemas em Otimização (Minimização de Funcionais, Solução de Sistemas de Equações Não Lineares, etc)
  - ?
- **Alguns Subsídios:**
  - Teoria e métodos: Cálculo, Métodos Numéricos, Análise Numérica, Análise Funcional, etc
  - Ferramentas Computacionais: Computadores de última geração, Linguagens de Programação, Pacotes Computacionais (MATLAB, MATHEMATICA, etc)

Obs. Computação Científica $\neq$ Ciências da Computação

I. $P_m(\lambda) = A_m\lambda^m + A_{m-1}\lambda^{m-1} + \cdots + A_1\lambda + A_0, \quad A_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$\Lambda(P) \equiv$ Espectro de $P_m(\lambda) = \{\text{raízes da equação } \det(P_m(\lambda)) = 0\}$

- $n = 1 \Rightarrow P_m(\lambda)$ escalar. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{raízes de } P_m(\lambda)\}$$

- $m = 1,\ n > 1,\quad A_1 = I \Rightarrow P_1(\lambda) = \lambda I + A_0$.

$$\Lambda(P_m) = \{\lambda,\ \det(\lambda I + A_0) = 0\} = \{\text{Autovalores de } A_0\}$$

- $m = 1,\quad A_1 \neq I \Rightarrow P_1(\lambda) = A_1\lambda + A_0$. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{Autovares Generalizados de } (A_0, A_1)\}$$

I. $P_m(\lambda) = A_m\lambda^m + A_{m-1}\lambda^{m-1} + \cdots + A_1\lambda + A_0, \quad A_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$\Lambda(P) \equiv$ Espectro de $P_m(\lambda) = \{\text{raízes da equação } \det(P_m(\lambda)) = 0\}$

- $n = 1 \Rightarrow P_m(\lambda)$ escalar. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{raízes de } P_m(\lambda)\}$$

- $m = 1,\ n > 1, \quad A_1 = I \Rightarrow P_1(\lambda) = \lambda I + A_0$.

$$\Lambda(P_m) = \{\lambda,\ \det(\lambda I + A_0) = 0\} = \{\text{Autovalores de } A_0\}$$

- $m = 1, \quad A_1 \neq I \Rightarrow P_1(\lambda) = A_1\lambda + A_0$. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{Autovares Generalizados de } (A_0, A_1)\}$$

I. $P_m(\lambda) = A_m\lambda^m + A_{m-1}\lambda^{m-1} + \cdots + A_1\lambda + A_0, \quad A_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$\Lambda(P) \equiv$ Espectro de $P_m(\lambda) = \{\text{raízes da equação } \det(P_m(\lambda)) = 0\}$

- $n = 1 \Rightarrow P_m(\lambda)$ escalar. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{raízes de } P_m(\lambda)\}$$

- $m = 1,\ n > 1, \quad A_1 = I \Rightarrow P_1(\lambda) = \lambda I + A_0.$

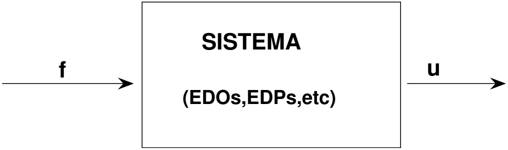
$$\Lambda(P_m) = \{\lambda,\ \det(\lambda I + A_0) = 0\} = \{\text{Autovalores de } A_0\}$$

- $m = 1, \quad A_1 \neq I \Rightarrow P_1(\lambda) = A_1\lambda + A_0$. Assim,

$$\Lambda(P_m) = \{\text{Autovares Generalizados de } (A_0, A_1)\}$$

II. Modelos

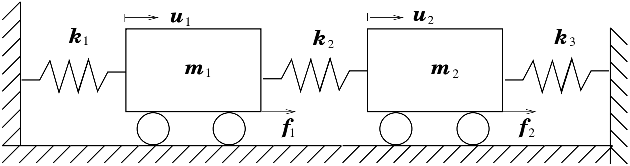
Modelo Frequênte: Interação Entrada-Saída



$$\mathcal{A} : X \to Y, \quad X, Y : \quad \text{Espaços apropriados}$$

$$\mathcal{A} : \begin{cases} \bullet \quad \text{Operador diferencial} \\ \bullet \quad \text{Operador Integral} \\ \bullet \quad \text{Matriz, etc} \end{cases}$$

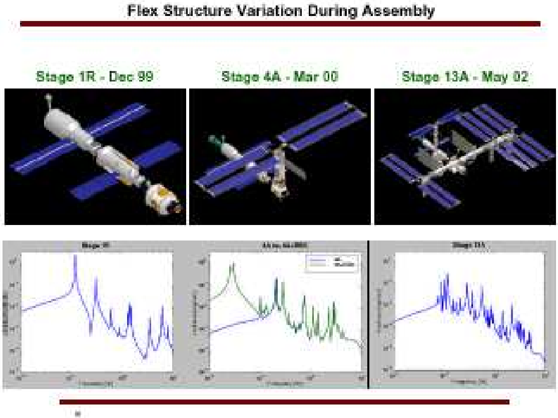
$$\text{Equação:} \quad \mathcal{A}u = f, \quad u = ?$$



$$\text{Newton} \Rightarrow \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{u}_1 \\ \ddot{u}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 \\ -k_2 & k_2 + k_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix},$$

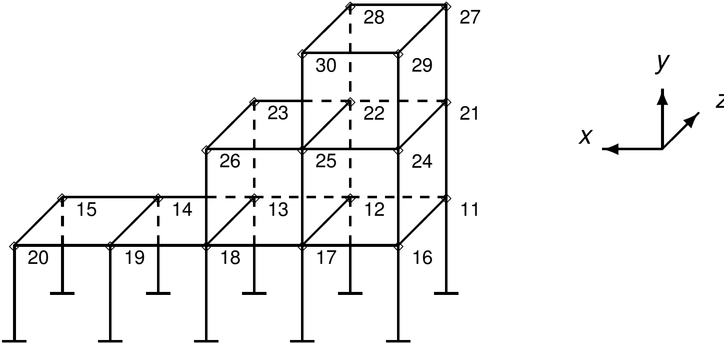
$$\text{Modelo}: \; M\ddot{u}(t) + Ku(t) = f(t), \quad u(t) = ?$$

II. Modelos. Um Sistema complexo: Estação Espacial Internacional



$$\text{Modelo}: \begin{cases} \dot{x} = Ax + Bf \\ u = Cx + Df, \end{cases}$$

$$x \in \mathbb{R}^n,\ f \in \mathbb{R}^p,\ u \in \mathbb{R}^q,\ \ n: \text{Muito grande}$$

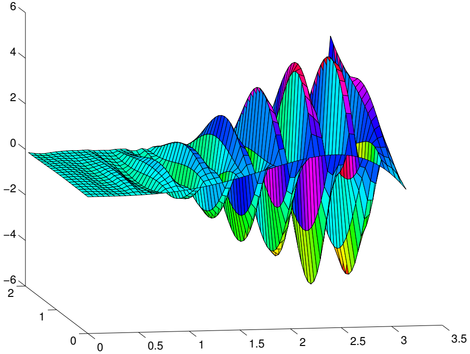


Discretização no espaço

$$\Downarrow$$

$$\text{Modelo}: \; M\ddot{u}(t) + C\dot{u}(t) + Ku(t) = f(t), \quad u(t),\; f(t) \in \mathbb{R}^n.$$

$$\text{Modelo}: \begin{cases} u_{tt} + \varepsilon a(x) u_t = \Delta u, \quad x \in [0,\pi], \ \varepsilon > 0, \\ u(t,0) = u(t,\pi) = 0, \\ u(0,x) = f(x), \ 0 < x < \pi, u_t(0,x) = g(x) \ 0 < x < \pi \end{cases}$$



Corda vibrante em níveis de tempo

III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um Sistema Simples

$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1 u'(t) + a_0 u(t) = f(t), \ t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, \ u'(a) = \alpha_1, \cdots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

- A Solução do PVI depende do espectro (as raízes) do polinômio

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0,$$

△ Qual o comportamento das raízes de $p(t)$ quando os coef. a_k sofrem pequenas perturbações?

III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um Sistema Simples

$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1 u'(t) + a_0 u(t) = f(t), \ t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, \ u'(a) = \alpha_1, \cdots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

- A Solução do PVI depende do espectro (as raízes) do polinômio

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0,$$

△ Qual o comportamento das raízes de $p(t)$ quando os coef. a_k sofrem pequenas perturbações?

III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um Sistema Simples

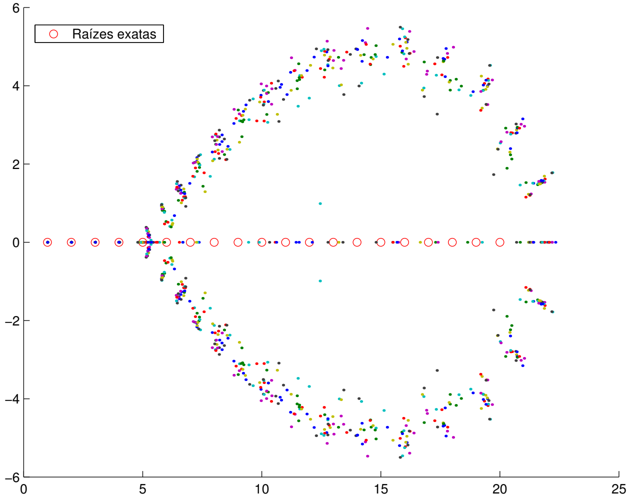
$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1 u'(t) + a_0 u(t) = f(t), \ t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, \ u'(a) = \alpha_1, \cdots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

- A Solução do PVI depende do espectro (as raízes) do polinômio

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0,$$

△ Qual o comportamento das raízes de $p(t)$ quando os coef. a_k sofrem pequenas perturbações?

Espectro do Polinômio de Wilkinson $P_w(t) = (t-1)(t-2)\cdots(t-20)$ com coef. perturbados $\widetilde{a}_k$: $|\widetilde{a}_k - a_k|/a_k = 10^{-10} r_k$, r_k random, média zero e var. 1



III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um pouco de Teoria

$$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0, \quad \text{raízes } \lambda_j.$$

$$\widetilde{p}_m(t) = t^m + \widetilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \widetilde{a}_1 t + \widetilde{a}_0, \quad \widetilde{a}_k = a_k + \delta a_k \text{ e raízes } \widetilde{\lambda}_j$$

- **Estimativa Teórica de erro:**

  Para λ_j com multiplicidade q, $\|[\delta a_0, \ldots, \delta a_{m-1}]\| = \varepsilon \approx 0$, vale: (Chatelin, 1996, Bazán, 2005)

$$|\widetilde{\lambda}_j - \lambda_j| \approx \varepsilon^{1/q}\kappa_j(\lambda_j).$$

  $\kappa_j(\lambda_j)$: Condição de λ_j (mede a sensibilidade da raiz)

△ Para a raiz $\lambda = 15$ do Polinômio de Wilkinson

$$\kappa_j(\lambda_j)\| \approx 5.1x10^{13}$$

III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um pouco de Teoria

$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0, \quad$ raízes λ_j.

$\widetilde{p}_m(t) = t^m + \widetilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \widetilde{a}_1 t + \widetilde{a}_0, \quad \widetilde{a}_k = a_k + \delta a_k$ e raízes $\widetilde{\lambda}_j$

- **Estimativa Teórica de erro:**

  Para λ_j com multiplicidade q, $\|[\delta a_0, \ldots, \delta a_{m-1}]\| = \varepsilon \approx 0$, vale: (Chatelin, 1996, Bazán, 2005)

$$|\widetilde{\lambda}_j - \lambda_j| \approx \varepsilon^{1/q} \kappa_j(\lambda_j).$$

  $\kappa_j(\lambda_j)$: Condição de λ_j (mede a sensibilidade da raiz)

△ Para a raiz $\lambda = 15$ do Polinômio de Wilkinson

$$\kappa_j(\lambda_j)\| \approx 5.1x10^{13}$$

III. Variação do Espectro de Polinômios Escalares: Um pouco de Teoria

$$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1 t + a_0, \quad \text{raízes } \lambda_j.$$

$$\widetilde{p}_m(t) = t^m + \widetilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \widetilde{a}_1 t + \widetilde{a}_0, \quad \widetilde{a}_k = a_k + \delta a_k \text{ e raízes } \widetilde{\lambda}_j$$

- **Estimativa Teórica de erro:**

  Para λ_j com multiplicidade q, $\|[\delta a_0, \ldots, \delta a_{m-1}]\| = \varepsilon \approx 0$, vale: (Chatelin, 1996, Bazán, 2005)

$$|\widetilde{\lambda}_j - \lambda_j| \approx \varepsilon^{1/q} \kappa_j(\lambda_j).$$

  $\kappa_j(\lambda_j)$: Condição de λ_j (mede a sensibilidade da raiz)

△ Para a raiz $\lambda = 15$ do Polinômio de Wilkinson

$$\kappa_j(\lambda_j)\| \approx 5.1x10^{13}$$

III. Espectro de Matrizes Não Normais

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é NORMAL $\Leftrightarrow A^T A = AA^T$
- $A^T A \neq AA^T \Rightarrow A$ NÃO NORMAL
- Medidas de NÃO NORMALIDADE?

$\triangle \quad \mu_1 = \|A^T A - AA^T\|$

$\triangle \quad \mu_2 = \|A\|_F^2 - \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|^2$ (Henrici, 1962)

$\triangledown \quad \mu = 0 \Rightarrow A$ NORMAL

$\triangledown \quad \mu \approx 0 \Rightarrow A$ QUASE NORMAL

III. Espectro de Matrizes Não Normais

- $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é NORMAL $\Leftrightarrow A^T A = AA^T$
- $A^T A \neq AA^T \Rightarrow A$ NÃO NORMAL
- Medidas de NÃO NORMALIDADE?

$\triangle$ $\mu_1 = \|A^T A - AA^T\|$

$\triangle$ $\mu_2 = \|A\|_F^2 - \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|^2$ (Henrici, 1962)

$\triangledown$ $\mu = 0 \Rightarrow A$ NORMAL

$\triangledown$ $\mu \approx 0 \Rightarrow A$ QUASE NORMAL

III. Espectro de Matrizes Não Normais

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é NORMAL $\Leftrightarrow A^T A = AA^T$
- $A^T A \neq AA^T \Rightarrow A$ NÃO NORMAL
- Medidas de NÃO NORMALIDADE?

△ $\mu_1 = \|A^T A - AA^T\|$

△ $\mu_2 = \|A\|_F^2 - \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|^2$ (Henrici, 1962)

▽ $\mu = 0 \Rightarrow A$ NORMAL

▽ $\mu \approx 0 \Rightarrow A$ QUASE NORMAL

III. Espectro de Matrizes Não Normais

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é NORMAL $\Leftrightarrow A^T A = AA^T$
- $A^T A \neq AA^T \Rightarrow A$ NÃO NORMAL
- Medidas de NÃO NORMALIDADE?

$\triangle$ $\mu_1 = \|A^T A - AA^T\|$

$\triangle$ $\mu_2 = \|A\|_F^2 - \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|^2$ (Henrici, 1962)

$\bigtriangledown$ $\mu = 0 \Rightarrow A$ NORMAL

$\bigtriangledown$ $\mu \approx 0 \Rightarrow A$ QUASE NORMAL

$$S_\nu = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & & & \\ -y_1 & x_1 & \nu & & & & & \\ & & x_2 & y_2 & & & & \\ & & -y_2 & x_2 & \nu & & & \\ & & & & \ddots & \nu & & \\ & & & & & x_N & y_N \\ & & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \; x_i \in \mathbb{R}, \; y_i \in \mathbb{R}$$

$$A_\nu = QS_\nu Q^T, \quad Q \text{ Unitária}$$

- $$\lambda(S_\nu) = \{x_k \pm \imath y_k, \;\; k = 1, \ldots, N\} = \lambda(A_\nu)$$
- O espectro de S_ν, A_ν , NÃO DEPENDE DE ν, mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale

$$\mu_2 = \sqrt{N-1}\,\nu$$

III. Espectro de Matrizes Não Normais. Um exemplo Ilustrativo

$$S_\nu = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & & & \\ -y_1 & x_1 & \nu & & & & & \\ & & x_2 & y_2 & & & & \\ & & -y_2 & x_2 & \nu & & & \\ & & & & \ddots & \nu & & \\ & & & & & x_N & y_N \\ & & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \; x_i \in \mathbb{R}, \; y_i \in \mathbb{R}$$

$$A_\nu = Q S_\nu Q^T, \quad Q \,\text{Unitária}$$

- $$\lambda(S_\nu) = \{x_k \pm \imath y_k, \; k = 1, \ldots, N\} = \lambda(A_\nu)$$

- O espectro de S_ν, A_ν , NÃO DEPENDE DE ν, mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale

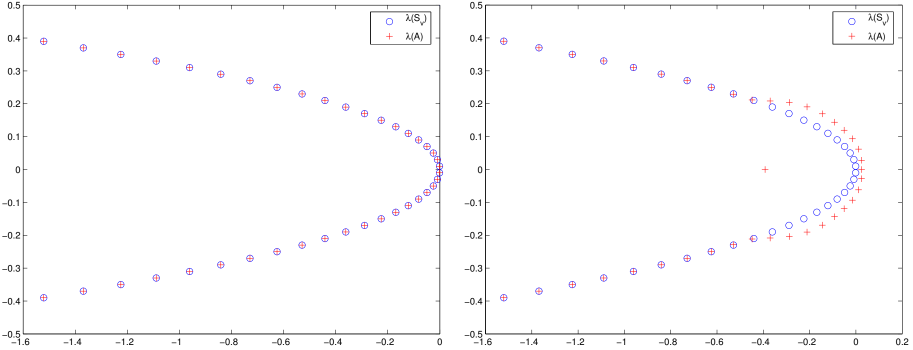
$$\mu_2 = \sqrt{N-1}\,\nu$$

$$S_\nu = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & & & \\ -y_1 & x_1 & \nu & & & & & \\ & & x_2 & y_2 & & & & \\ & & -y_2 & x_2 & \nu & & & \\ & & & & \ddots & \nu & & \\ & & & & & x_N & y_N \\ & & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \; x_i \in \mathbb{R}, \; y_i \in \mathbb{R}$$

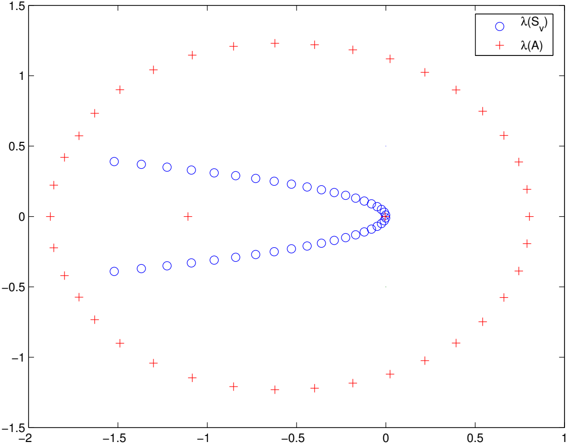
$$A_\nu = Q S_\nu Q^T, \;\; Q \, \text{Unitária}$$

- $$\lambda(S_\nu) = \{x_k \pm \imath y_k, \;\; k = 1, \ldots, N\} = \lambda(A_\nu)$$
- O espectro de S_ν, A_ν , NÃO DEPENDE DE ν, mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale
$$\mu_2 = \sqrt{N-1}\,\nu$$

III. Espectro de Matrizes Não Normais. Influência de erros de arredondamento no Espectro de S_ν, A_ν . Caso: $\nu = 3,\ 5$; $N = 20$ e autov. na parábola $x = -10y^2$



III.Espectro de Matrizes Não Normais. Influência de erros de arredondamento no Espectro das matrizes S_ν, A_ν . Caso: $\nu = 50$, $N = 20$



III. Influência do Espectro no comportamento de Métodos Iterativos para sistema de equações lineares $Ax = b$:

Fazendo : $A = M - N$ a solução x^* satisfaz

$$Ax^* = b \Leftrightarrow x^* = M^{-1}Nx^* + M^{-1}b$$

Métodos iterativos: $G = M^{-1}N$, $f = M^{-1}b$

$$\begin{aligned} x_0 &: \ \text{Aprox. Inicial} \\ x_{k+1} &= Gx_k + f, \quad k = 0, 1, \ldots \end{aligned}$$

Aritmética exata: $x_{k+1} = (I + G + G^2 + \cdots + G^k)f + G^{k+1}x_0$ Assim,

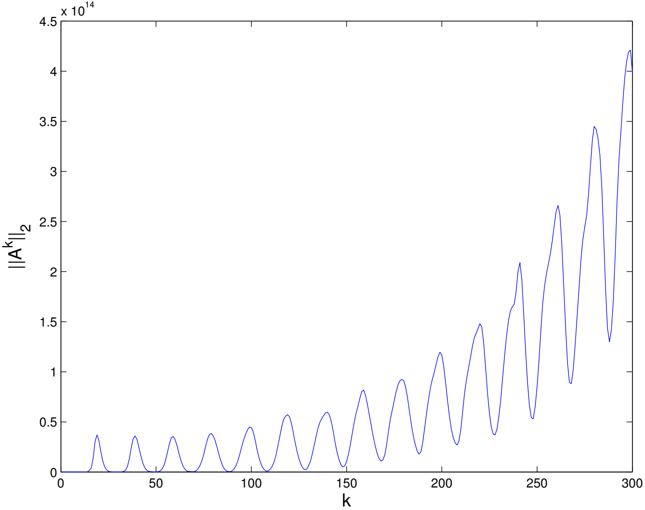
$$x_k \to x^* \Leftrightarrow \rho(G) < 1$$

Podemos esperar o mesmo resultado em aritmética de ponto flutuante?

III. Influência do Espectro no comportamento de A^k

Exemplo: $A_\nu = QS_\nu Q^T \quad N = 20, \ \nu = 250.$

Convergência teórica : $\rho(A_\nu) =\approx 0.40 \Longleftrightarrow \lim_{k\to\infty} A_\nu^k = 0.$



IV. Conclusões:

- Raízes de polinômios podem ser muito sensíveis a pequenas perturbações nos coef.
- O espectro de matrizes com alta não normalidade é, em geral, muito sensível a pequenas perturbações na matriz.
- Alta não normalidade afeta a performance de Métodos Iterativos para sistemas lineares, tornando os métodos muito lentos ou divergentes.
- O efeito de não normalidade de matrizes em comp. científica é entendido melhor através do conceito de **Pseudo-espectro**. Isto fica para uma outra oportunidade !

Referências sobre o assunto? Contact me !!

OBRIGADOOOOO!!

IV. Conclusões:

- Raízes de polinômios podem ser muito sensíveis a pequenas perturbações nos coef.

- O espectro de matrizes com alta não normalidade é, em geral, muito sensível a pequenas perturbações na matriz.

- Alta não normalidade afeta a performance de Métodos Iterativos para sistemas lineares, tornando os métodos muito lentos ou divergentes.

- O efeito de não normalidade de matrizes em comp. científica é entendido melhor através do conceito de **Pseudo-espectro**. Isto fica para uma outra oportunidade !

Referências sobre o assunto? Contact me !!

OBRIGADOOOOO!!