

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:**

• A Computação Científica é uma disciplina que se preocupa com a resolução de problemas científicos e tecnológicos usando computadores. Ela é uma área interdisciplinar que envolve matemática, física, química, biologia, engenharia, geociências, entre outras.

• Os problemas abordados pela Computação Científica são geralmente complexos e exigem o uso de métodos numéricos para sua solução. Isso inclui a resolução de equações diferenciais, a otimização de sistemas, a análise estatística de dados, a simulação de processos físicos, entre outros.

• A Computação Científica também é responsável por desenvolver e implementar algoritmos e softwares para a execução de tarefas computacionais, como a geração de códigos, a criação de interfaces gráficas, a manipulação de dados e a visualização de resultados.

• A área da Computação Científica é fundamental para o avanço da ciência e tecnologia, contribuindo para a solução de problemas complexos e a criação de novas aplicações.

Obs. Computação Científica ≠ 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,

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

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

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

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

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

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,

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

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

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

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

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

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,

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

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

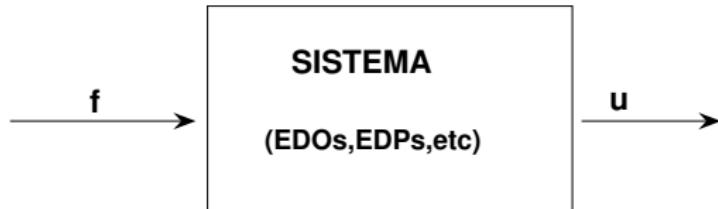
$$\Lambda(P_m) = \{\lambda, \det(\lambda I + A_0) = 0\} = \{\text{Autovalores de } A_0\}$$

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

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

II. Modelos

Modelo Frequente: Interação Entrada-Saída

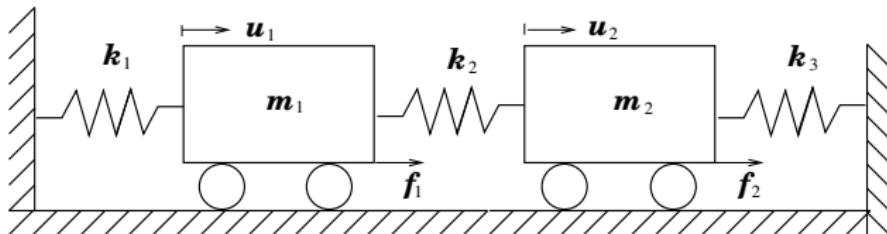


$\mathcal{A} : X \rightarrow Y, \quad X, Y : \text{ Espaços apropriados}$

- $$\mathcal{A} : \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ Operador diferencial} \\ \bullet \text{ Operador Integral} \\ \bullet \text{ Matriz, etc} \end{array} \right.$$

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

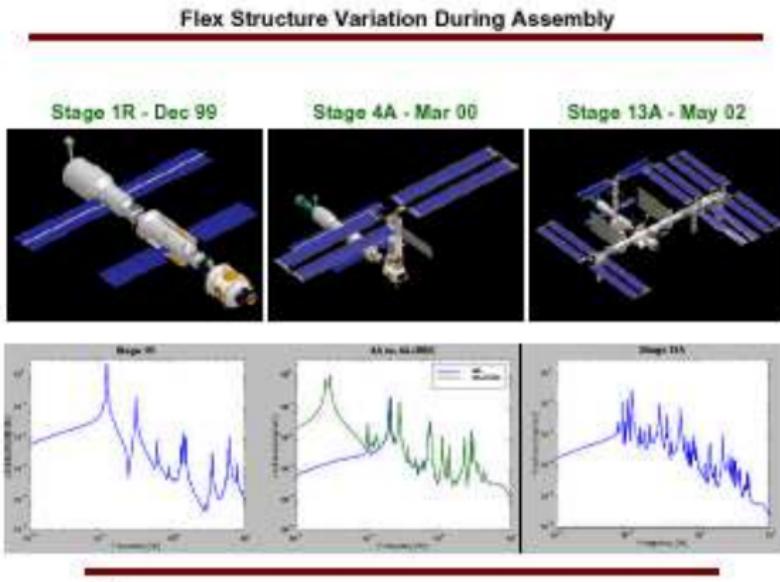
II. Modelos. Sistema Vibratório



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

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

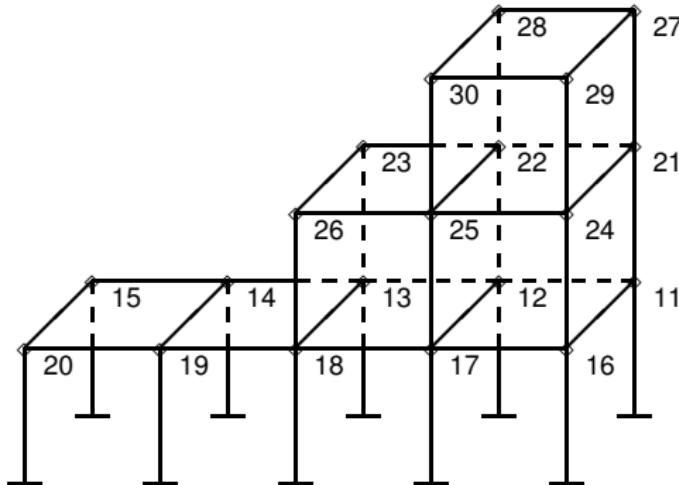
II. Modelos. Um Sistema complexo: Estação Espacial Internacional



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

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

II. Modelos. Dinâmica de estruturas: Protótipo de um prédio



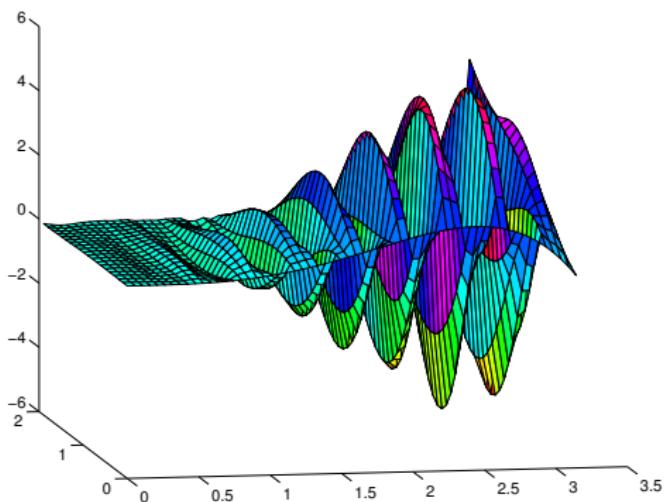
Discretização no espaço



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

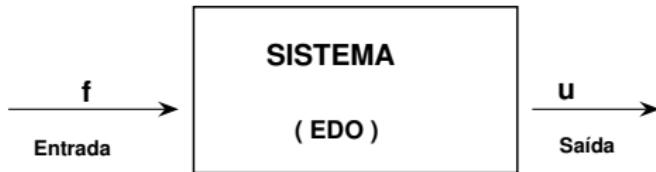
II. Modelos. Corda Vibrante: vibrações livres

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



Corda vibrante em níveis de tempo

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



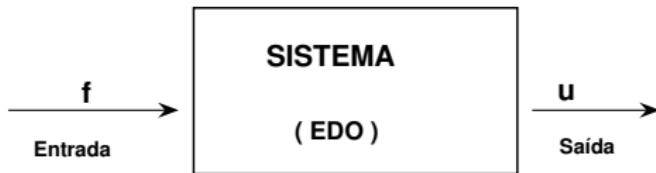
$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1u'(t) + a_0u(t) = f(t), & t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, u'(0) = \alpha_1, \dots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

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

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0,$$

- △ 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



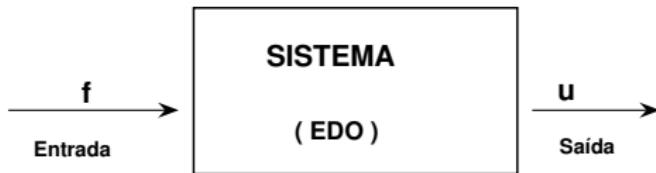
$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1u'(t) + a_0u(t) = f(t), & t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, u'(0) = \alpha_1, \dots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

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

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0,$$

- △ 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



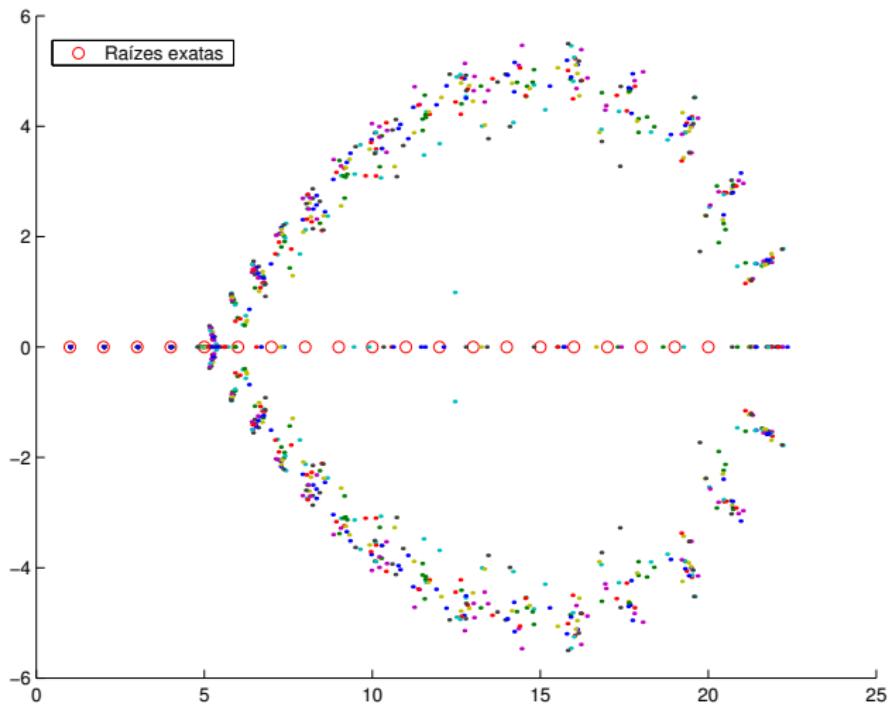
$$\begin{cases} u^{(m)}(t) + a_{m-1}u^{(m-1)}(t) + \cdots + a_1u'(t) + a_0u(t) = f(t), & t \geq 0 \\ u(0) = \alpha_0, u'(0) = \alpha_1, \dots, u^{(m-1)}(0) = \alpha_{m-1}. \end{cases}$$

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

$$p(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0,$$

- △ 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 \tilde{a}_k : $|\tilde{a}_k - a_k|/a_k = 10^{-10}r_k$, r_k random, média zero e var. 1



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

$$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0, \quad \text{raízes } \lambda_j.$$

$$\tilde{p}_m(t) = t^m + \tilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \tilde{a}_1t + \tilde{a}_0, \quad \tilde{a}_k = a_k + \delta a_k \text{ e raízes } \tilde{\lambda}_j$$

- Estimativa Teórica de erro:

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

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

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

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

$$\kappa_j(\lambda_j) \approx 5.1 \times 10^{13}$$

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

$$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0, \quad \text{raízes } \lambda_j.$$

$$\tilde{p}_m(t) = t^m + \tilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \tilde{a}_1t + \tilde{a}_0, \quad \tilde{a}_k = a_k + \delta a_k \text{ e raízes } \tilde{\lambda}_j$$

- **Estimativa Teórica de erro:**

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

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

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

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

$$\kappa_j(\lambda_j) \approx 5.1 \times 10^{13}$$

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

$$p_m(t) = t^m + a_{m-1}t^{m-1} + \cdots + a_1t + a_0, \quad \text{raízes } \lambda_j.$$

$$\tilde{p}_m(t) = t^m + \tilde{a}_{m-1}t^{m-1} + \cdots + \tilde{a}_1t + \tilde{a}_0, \quad \tilde{a}_k = a_k + \delta a_k \text{ e raízes } \tilde{\lambda}_j$$

- **Estimativa Teórica de erro:**

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

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

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

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

$$\kappa_j(\lambda_j) \approx 5.1 \times 10^{13}$$

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?

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

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

$$\triangledown \quad \mu = 0 \Rightarrow A \text{ NORMAL}$$

$$\triangledown \quad \mu \approx 0 \Rightarrow A \text{ QUASE NORMAL}$$

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?

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

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

$$\nabla \quad \mu = 0 \Rightarrow A \text{ NORMAL}$$

$$\nabla \quad \mu \approx 0 \Rightarrow A \text{ QUASE NORMAL}$$

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?
 - △ $\mu_1 = \|A^T A - AA^T\|$
 - △ $\mu_2 = \|A\|_F^2 - \sum_{j=1}^n |\lambda_j|^2$ (Henrici, 1962)
 - ▽ $\mu = 0 \Rightarrow A$ NORMAL
 - ▽ $\mu \approx 0 \Rightarrow A$ QUASE NORMAL

III. Espectro de Matrizes Não Normais. Um exemplo Ilustrativo

$$S_v = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & \\ -y_1 & x_1 & v & & & \\ & & x_2 & y_2 & & \\ & & -y_2 & x_2 & v & \\ & & & & \ddots & v \\ & & & & & x_N & y_N \\ & & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \quad x_i \in \mathbb{R}, y_i \in \mathbb{R}$$

$$A_v = Q S_v Q^T, \quad Q \text{ Unitária}$$



$$\lambda(S_v) = \{x_k \pm iy_k, \quad k = 1, \dots, N\} = \lambda(A_v)$$

- O espectro de S_v , A_v , NÃO DEPENDE DE v , mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale

$$\mu_2 = \sqrt{N-1} v$$

III. Espectro de Matrizes Não Normais. Um exemplo Ilustrativo

$$S_v = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & \\ -y_1 & x_1 & v & & & \\ & & x_2 & y_2 & & \\ & & -y_2 & x_2 & v & \\ & & & \ddots & & v \\ & & & & x_N & y_N \\ & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \quad x_i \in \mathbb{R}, y_i \in \mathbb{R}$$

$$A_v = Q S_v Q^T, \quad Q \text{ Unitária}$$



$$\lambda(S_v) = \{x_k \pm i y_k, \quad k = 1, \dots, N\} = \lambda(A_v)$$

- O espectro de S_v , A_v , NÃO DEPENDE DE v , mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale

$$\mu_2 = \sqrt{N-1} v$$

III. Espectro de Matrizes Não Normais. Um exemplo Ilustrativo

$$S_v = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & & & & \\ -y_1 & x_1 & v & & & \\ & & x_2 & y_2 & & \\ & & -y_2 & x_2 & v & \\ & & & & \ddots & v \\ & & & & & x_N & y_N \\ & & & & & -y_N & x_N \end{bmatrix}, \quad x_i \in \mathbb{R}, y_i \in \mathbb{R}$$

$$A_v = Q S_v Q^T, \quad Q \text{ Unitária}$$

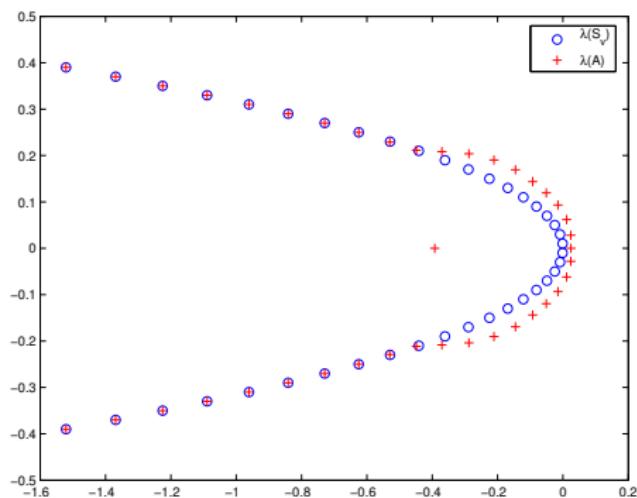
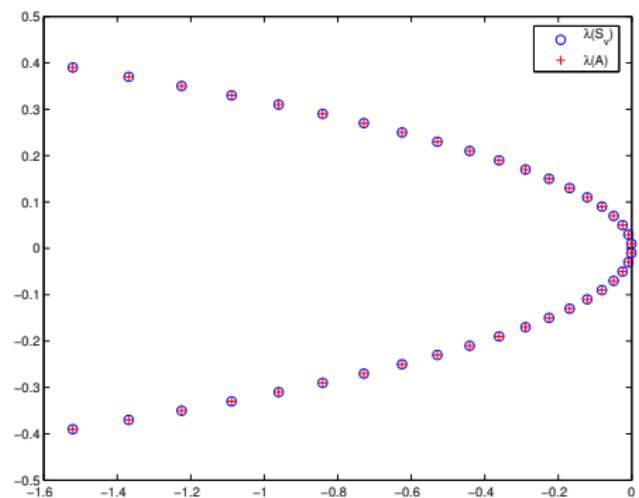


$$\lambda(S_v) = \{x_k \pm i y_k, \quad k = 1, \dots, N\} = \lambda(A_v)$$

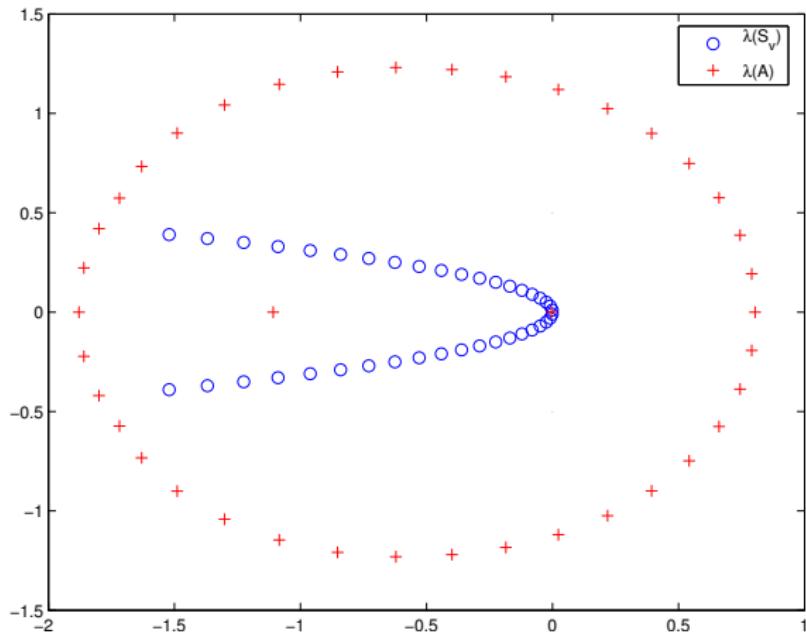
- O espectro de S_v , A_v , NÃO DEPENDE DE v , mas a não normalidade SIM!. Em particular, vale

$$\mu_2 = \sqrt{N-1} v$$

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



III. Espectro de Matrizes Não Normais. Influência de erros de arredondamento no Espectro das matrizes S_v , A_v . Caso: $v = 50$, $N = 20$



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

x_0 : Aprox. Inicial

$$x_{k+1} = Gx_k + f, \quad k = 0, 1, \dots$$

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

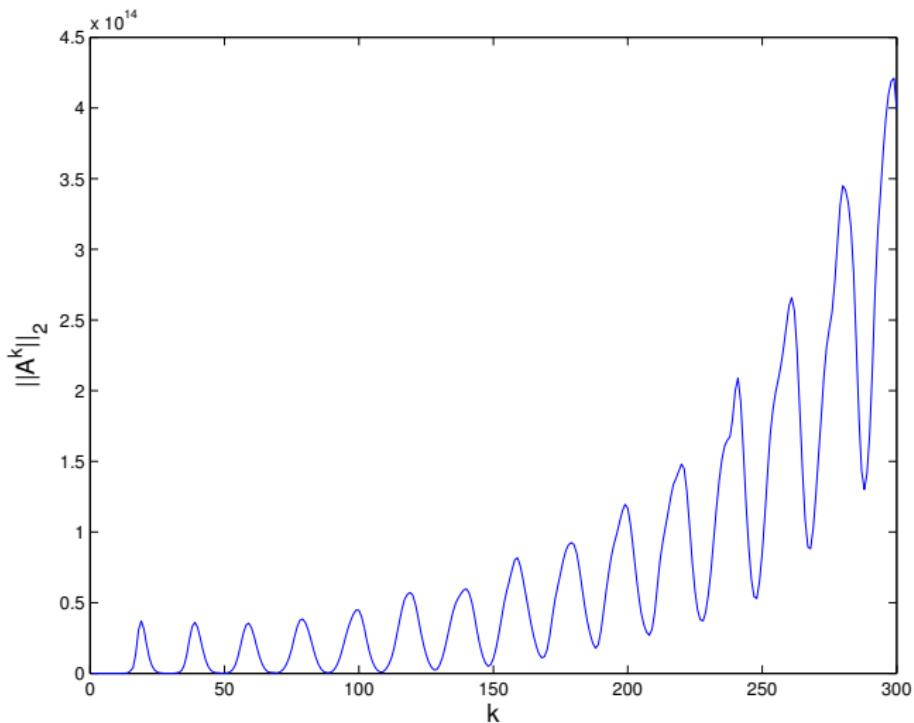
$$x_k \rightarrow x^* \Leftrightarrow \rho(G) < 1$$

Podemos esperar o mesmo resultado em aritmética de ponto flutuante?

III. Influência do Espectro no comportamento de A^k

Exemplo: $A_v = QS_v Q^T$ $N = 20$, $v = 250$.

Convergência teórica : $\rho(A_v) \approx 0.40 \iff \lim_{k \rightarrow \infty} A_v^k = 0$.



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!!