UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Instituto de Matemática

ASPECTOS ANALÍTICOS COMPUTACIONAIS EM FUNÇÕES MATRICIAIS E SOLUÇÕES DINÂMICAS*

Maria Inês Martins Copetti

Dissertação realizada sob a orientação do Dr. Julio Cesar Ruiz Claeyssen, apresentada ao Instituto de Matemática da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Matemática.

* Trabalho parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Porto Alegre

1986

AGRADEÇO A

Julio Cesar Ruiz Claeyssen, pela orientação.
Marcus, pela colaboração e apoio.

DEDICO A

Marcus e Rafaela.

RESUMO

Neste trabalho, são apresentados aspectos analíticos computacionais emfunções matriciais, enfatizando-se os métodos de Aproximação de Runckel-Pittelkow, dos Aproximantes de Padé e de Decomposição Matricial.

É estudada também, a sensibilidade das funções matriciais, isto é, o comportamento das funções matriciais frente perturbações da matriz.

Como importante aplicação das fórmulas de Runckel & Pittelkow são obtidas expressões para a solução dinâmica de uma equação diferencial matricial. Além disso, com base nestas fórmulas, é apresentado um programa computacional para computar exponenciais matriciais.

ÍNDICE

I - FUNÇÕES MATRICIAIS

I.1 - Introdução

Freqüentemente, a solução de problemas matemáticos é simplificada pelo uso de funções matriciais. Diversas definições de funções matriciais tem sido apresentadas. A equivalência entre estas definições é objeto de estudo de Rinehart em seu artigo "The Equivalence of Definitions of a Matrix Function" [18].

Neste capítulo, faremos um sucinto estudo de funções matriciais.

Na seção I.2, apresentamos a definição de uma função matricial $f(A)$, extensão de uma função escalar $f(z)$, via sua série de Taylor, através da simples substituição da variável z pela matriz A na série de potências. A seguir, mostramos por meio do "teorema de redução", que a soma de uma série de potências matricial é, na verdade, igual a um polinômio matricial, cujos coeficientes dependem exclusivamente dos autovalores da matriz. Para a exponencial matricial aplicamos o método da transformada de Laplace e obtemos, de maneira alternativa, sua expressão polinomial, cuja existência é assegurada pelo resultado anterior.

Através da versão matricial do teorema integral de Cauchy, na seção I.3 estabelecemos a definição de função matricial a partir de uma função escalar analítica. Esta definição, apesar de pouco prática, pode ser utilizada para a demonstração de propriedades importantes das funções matriciais. Por exemplo, se a matriz A for diagonalizável, então a função matricial $f(A)$ tem uma expressão extremamente simples.

Baseados nos resultados anteriores, na seção I.4 enfatizamos a importante conclusão de que são fundamentais apenas os valores da função escalar e suas derivadas sobre o espectro da matriz considerada.

Uma importante propriedade, tanto sob o ponto de vista prático como teórico, é o comportamento da função matricial frente perturbações da matriz. Na seção I.5 estudamos a sensibilidade das funções matriciais.

O conceito de norma matricial é revisado na seção I.6.

I.2 - Definição por série de Taylor

Suponhamos que $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ seja uma série de potências com raio de convergência $\rho > 0$, onde z é uma variável complexa.

Se A é uma matriz complexa nxn com raio espectral $r(A) < \rho$ ($r(A) = \max \{|\mu| / \mu$ é autovalor de $A\}$), definimos a função matricial f(A) por

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k$$

Esta definição tem sentido desde que a condição sobre o raio espectral $r(A) < \rho$ nos garante a convergência absoluta da série matricial com respeito a alguma norma matricial (ver seção I.6).

I.2.1 - Teorema de redução

Seja $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ uma função escalar com raio de convergência $\rho > 0$, e A uma matriz quadrada de ordem n com raio espectral $r(A) < \rho$.

Se c(z) é o polinômio característico da matriz A,

$$c(z) = \prod_{i=1}^{s} (z - \mu_i)^{n_i},$$

então

$$f(A) = R(A) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k A^k$$

onde os coeficientes b_k do polinômio $R(z) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k z^k$ são obtidos por interpolação de Hermite [35]:

$$f^{(k)}(z)\Big|_{z=\mu_i} = R^{(k)}(z)\Big|_{z=\mu_i}, \quad 1 \leq i \leq s, \; 0 \leq k \leq n_i - 1$$

$f^{(k)}(z)\Big|_{z=\mu_i}$ representa a derivada k-ésima da função f(z) calculada no ponto $z=\mu_i$.

A demonstração desta afirmação é como segue.

Dividindo f(z) por c(z) obtemos

$$f(z) = q(z)c(z) + R(z) \tag{1}$$

onde $R(z) = b_o + b_1 z + \ldots + b_{n-1} z^{n-1}$ é um polinômio de grau menor ou igual a n-1. Substituindo z por A na expressão (1), pelo teorema de Cayley-Hamilton, temos f(A)=R(A) pois c(A)=0.

Derivando a expressão (1) k-vezes e usando a regra de Leibniz temos

$$f^{(k)}(z) = \sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} q^{(k-j)}(z)\, c^{(j)}(z) + R^{(k)}(z)$$

Desde que $c^{(j)}(\mu_i)=0$ para $j = 0,\ldots,n_i-1$ segue que

$$f^{(k)}(\mu_i) = R^{(k)}(\mu_i) \text{ para todo autovalor } \mu_i.$$

Observemos que se a matriz A possuir n autovalores distintos então as equações que determinam os coeficientes b_k são

$$f(\mu_i) = R(\mu_i),\ i = 1,\ldots,n.$$

Neste caso, verifica-se que

$$R(z) = f(\mu_1)L_1(z) + \ldots + f(\mu_n)L_n(z), \text{ onde}$$

$$L_k(z) = \prod_{\substack{i=1 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(z - \mu_i)}{(\mu_k - \mu_i)} \quad , \ k = 1,\ldots,n$$

são os polinômios de Lagrange e satisfazem $L_k(\mu_j) = \delta_{kj}$.

O teorema da redução diz, então, que o valor soma de uma série de potências matricial é, na verdade, igual a um polinômio matricial cujos coeficientes dependem somente dos autovalores da matriz considerada.

I.2.2 - Transformada de Laplace

Apresentaremos o método da transformada de Laplace somente para a função matricial exp(At)

A transformada de Laplace de uma função matricial de variável real $F(t)=[F_{ij}(t)]$ é definida por

$$\pounds(F)(s) = \int_0^\infty e^{-st} F(t)\, dt = \lim_{a\to\infty} \int_0^a e^{-st} F(t)\, dt$$

sempre que esta integral existir, sendo que a integral é efetuada componente a componente. Então existe $\mathcal{L}(F)(s)$ para todo s tal que as componentes $F_{ij}(t)$ possuem transformadas.

Para o caso da função matricial exp(At) obtém-se que

[23] $\mathcal{L}(\exp(At))(s) = (sI - A)^{-1}$ para todo s tal que $\|A\| < s$

Portanto

$$\exp(At) = \mathcal{L}^{-1}\ ((sI - A)^{-1})$$

onde as transformadas inversas são calculadas pelos métodos usuais.

Para computar a inversa $(sI - A)^{-1}$ introduzimos a matriz adjunta $B(s) = \text{adj}(sI - A)$ que satisfaz

$$(sI - A)\ B(s) = \det(sI - A)\ I$$

Assim sendo,

$$\mathcal{L}(\exp(At)) = \frac{B(s)}{\det(sI - A)} \quad , e$$

o problema se reduz a computar B(s).

Façamos $c(s) = \det(sI - A)$. Então,

$$(sI - A)\ B(s) = c(s)\ I$$

Derivando esta expressão em relação a s, decorre

$$B(s) = (A - sI)B'(s) + c'(s)I$$

$$2B'(s) = (A - sI)B''(s) + c''(s)I$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$(n-1)B^{(n-2)}(s) = (A - sI)B^{(n-1)}(s) + c^{(n-1)}(s)I$$

$$nB^{(n-1)}(s) = c^{(n)}(s)I,$$

desde que as componentes de B(s) são polinômios em s de grau n-1.

Como c(s) é um polinômio da forma $c(s)=s^n + \ldots + c_o$, temos que $c^{(n)}(s)I = n!I$. Portanto, obtemos $B(s)$ a partir do sistema de recursão:

$$B^{(n-1)}(s) = (n-1)!I$$

$$B^{(n-2)}(s) = 1/(n-1)\,[(A - sI)B^{(n-1)}(s) + c^{(n-1)}(s)I]$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$B'(s) = 1/2[(A - sI)B''(s) + c''(s)I]$$

$$B(s) = (A - sI)B'(s) + c'(s)I$$

Deste modo, $\exp(At) = \mathcal{L}^{-1}\left\{\dfrac{B(s)}{\det(sI - A)}\right\}$

Assim, mostramos, de maneira alternativa, que a exponencial matricial é um polinômio matricial.

I.3 - Definições Analíticas

Suponhamos que $f(z)$ seja uma função analítica em uma região limitada por uma curva de Jordan contendo no interior os autovalores da matriz A. Definimos então $f(A)$ por [6]:

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\gamma} \frac{f(z)}{(zI - A)}\,dz$$

Esta é uma versão matricial do teorema integral de Cauchy. Observemos, ainda, que $f(A)$ está definida sempre que $f(z)$ for analítica em uma vizinhança do espectro da matriz A.

Embora fraca, do ponto de vista computacional, a definição dada acima pode ser utilizada para obter caracterizações mais práticas de $f(A)$ [6] . Por exemplo, se $f(A)$ está definida e $A = PBP^{-1} = P\operatorname{diag}(B_1,\ldots,B_p)P^{-1}$, sendo B_i matriz de ordem n_i, então $f(A) = Pf(B)P^{-1} = P\operatorname{diag}(f(B_1),\ldots,f(B_p))P^{-1}$ onde $\operatorname{diag}(B_1,\ldots,B_p)$ é a matriz nxn

$$\begin{bmatrix} B_1 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & B_2 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots\cdots & B_p \end{bmatrix}$$

O objetivo é explorar a propriedade de similaridade $A = PBP^{-1}$ de modo que $f(B)$ seja simples de computar.

Desde que toda matriz A é similar a uma matriz na forma de Jordan, isto é, $A = PJP^{-1}$ onde $J = J_1 \oplus \cdots \oplus J_s$ e

$$J_k = \begin{bmatrix} \mu_k & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mu_k & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \mu_k \end{bmatrix}$$

decorre que $f(A) = Pf(J)P^{-1} = P\operatorname{diag}(f(J_1),\ldots,f(J_s))P^{-1}$ onde [6] [23]

$$f(J_k) = \begin{bmatrix} f(\mu_k) & f'(\mu_k) & \cdots\cdots & \dfrac{f^{(m-1)}(\mu_k)}{(m-1)!} \\ 0 & f(\mu_k) & f'(\mu_k)\cdots & \dfrac{f^{(m-2)}(\mu_k)}{(m-2)!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \;\cdots & f(\mu_k) \end{bmatrix}$$

e m é a ordem do bloco de Jordan J_k.

Se A for diagonalizável com autovalores $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n$ então $A = PDP^{-1}$ onde

$$D = \begin{bmatrix} \mu_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mu_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mu_n \end{bmatrix}$$

Em conseqüência,

$$f(A) = P \begin{bmatrix} f(\mu_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f(\mu_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f(\mu_n) \end{bmatrix} P^{-1}$$

Em particular, observa-se que se A for uma matriz diagonal então é muito simples computar f(A). Além disso, estes resultados ilustram uma relação entre a função matricial f(A) e os autovalores da matriz A.

I.4 - Conexão entre a função matricial f(A) e os autovalores da matriz A

Dos resultados estabelecidos observamos que é essencial conhecer apenas os valores que a função escalar f(z) e suas derivadas até ordem n_i-1 assumem em cada autovalor μ_i de multiplicidade n_i, ou então somente $f(\mu_i)$ se a matriz A for diagonalizável.

Este fato nos permite dar um sentido à f(A) para uma classe mais ampla de funções.

Seja A uma matriz nxn com autovalores distintos $\mu_1,\ldots$ $\ldots, \mu_s$ com multiplicidades $n_1,\ldots, n_s$ respectivamente.

Diremos que uma função escalar f(z) está definida no espectro de A se existirem os valores $f(\mu_i)$, $f'(\mu_i)$, $f''(\mu_i),\ldots$ $\ldots, f^{(n_i-1)}(\mu_i)$ para $i=1,\ldots,s$, e que R(z) é um polinômio de interpolação para f(z) se

$$R^{(k)}(\mu_i) = f^{(k)}(\mu_i) \quad , \quad k=0,\ldots,n_i-1 \ ; \ i=1,\ldots,s$$

Definimos então, para funções escalares f(z) de finidas no espectro de A,

$$f(A) = R(A)$$

I.5 - Sensibilidade

Estamos interessados em computar f(A) para uma dada função f e uma matriz quadrada A de ordem n. O objetivo é investigar como perturbações em A afetam a função matricial f(A). Se uma pequena perturbação ΔA causar uma grande modificação na função matricial, então o problema é dito mal condicionado.

Desejamos, então, analisar

$$\phi = \frac{\| f(A + \Delta A) - f(A) \|}{\| f(A) \|}$$

Consideremos $A=(a_{ij}) \in R^{n^2}$ e $f: R^{n^2} \to R^{n^2}$ diferenciável. Então

$$f(A + \Delta A) - f(A) = Df(A)\Delta A + R(\Delta A) \qquad \text{com}$$

$$\lim_{\|\Delta A\| \to 0} \frac{\| R(\Delta A) \|}{\| \Delta A \|} = 0$$

onde Df é a matriz $n^2 x n^2$ definida por

$$Df = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{11}}{\partial a_{11}} & \frac{\partial f_{11}}{\partial a_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial a_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f_{11}}{\partial a_{nn}} \\ \frac{\partial f_{21}}{\partial a_{11}} & \frac{\partial f_{21}}{\partial a_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial a_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f_{21}}{\partial a_{nn}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{n1}}{\partial a_{11}} & \frac{\partial f_{n1}}{\partial a_{21}} & & \frac{\partial f_{n1}}{\partial a_{n1}} & & \frac{\partial f_{n1}}{\partial a_{nn}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{nn}}{\partial a_{11}} & \frac{\partial f_{nn}}{\partial a_{21}} & \cdots & \frac{\partial f_{nn}}{\partial a_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f_{nn}}{\partial a_{nn}} \end{bmatrix}$$

e $\Delta A = (\Delta a_{11}, \Delta a_{21}, \ldots, \Delta a_{n1}, \ldots, \Delta a_{1n}, \Delta a_{2n}, \ldots, \Delta a_{nn})^t$ é um $n^2 x1$ vetor.

Então, $\| Df(A) \| \, \| \Delta A \|$ é uma medida para o erro absoluto $\| f(A + \Delta A) - f(A) \|$ devido a pequenas perturbações ΔA de A

enquanto que $\|Df(A)\| \, \|\Delta A\| \; / \; \|f(A)\|$ é uma medida para o erro relativo $\|f(A + \Delta A) - f(A)\| \; / \; \|f(A)\|$.

A norma $\|Df(A)\|$ é definida por

$$\|Df(A)\| = \sup_{\Delta A \neq 0} \frac{\|Df(A)\Delta A\|}{\|\Delta A\|} = \sup_{\|\Delta A\|=1} \|Df(A)\Delta A\|$$

Definimos então os números

$$\gamma(f,A) = \|Df(A)\|$$

e

$$\nu(f,A) = \frac{\|Df(A)\| \; \|A\|}{\|f(A)\|} = \gamma(f,A) \frac{\|A\|}{\|f(A)\|}$$

Consideremos o caso particular $f(A)=\exp(At)$. Desde que os problemas de valor inicial

$$\dot{X}(t) = A \, X(t)$$
$$X(0) = I$$

$$\dot{Y}(t) = (A + \Delta A) \, Y(t)$$
$$Y(0) = I$$

$$\dot{Z}(t) = A \, Z(t) + \Delta A \, Y(t)$$
$$Z(0) = 0$$

onde A, ΔA, $X(t)$, $Y(t)$, $Z(t)$ são matrizes nxn, têm como única solução

$$X(t) = e^{At} \; ,$$

$$Y(t) = e^{(A + \Delta A)t} \; ,$$

e

$$Z(t) = e^{At} \int_0^t e^{-As} \, \Delta A \, e^{(A + \Delta A)s} \, ds \qquad ,$$

e a função Y(t) - X(t) satisfaz o terceiro problema, concluímos que

$$e^{(A + \Delta A)t} - e^{At} = \int_0^t e^{(t-s)A}\, \Delta A\, e^{(A + \Delta A)s}\, ds$$

Mas
$$e^{(A + \Delta A)s} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[(A+\Delta A)s]^k}{k!} = I+(A+\Delta A)s+\frac{[(A+\Delta A)s]^2}{2!}+\ldots$$

$$= e^{As} + \Delta A\, [s + (A\, \Delta A + \frac{\Delta A}{2})s^2 + \ldots]$$

Portanto,

$$e^{(A+\Delta A)t} - e^{At} = \int_0^t e^{(t-s)A}\, \Delta A\, e^{As}\, ds \quad +$$
$$\int_0^t e^{(t-s)A}\, (\Delta A)^2\, [s + (A\Delta A + \frac{\Delta A}{2})s^2 + \ldots]\, ds$$
$$= \int_0^t e^{(t-s)A}\, \Delta A\, e^{As}\, ds \; + \; R(\Delta A).$$

com $\lim\limits_{\|\Delta A\| \to 0} \dfrac{\|R(\Delta A)\|}{\|\Delta A\|} = 0$

Da definição de $\gamma(f,A)$ e $\nu(f,A)$ concluimos que

$$\gamma(\exp, A) = \sup_{\|\Delta A\|=1} \left\| \int_0^t e^{(t-s)A}\, \Delta A\, e^{As}\, ds \right\|$$

e
$$\nu(\exp, A) = \sup_{\|\Delta A\|=1} \left\| \int_0^t e^{(t-s)A}\, \Delta A\, e^{As}\, ds \right\| \frac{\|A\|}{\|e^{At}\|}$$

$\nu(\exp, A)$ é chamado número de condição da exponencial matricial e é discutido por Van Loan em [28].

Assim, $\dfrac{\| e^{(A + \Delta A)t} - e^{At} \|}{\| e^{At} \|} \leq \nu(\exp, A) \dfrac{\| \Delta A \|}{\| A \|}$

Então, se $\nu(\exp, A)$ for grande, pequenas perturba - ções de A podem provocar mudanças relativamente grandes na fun- ção matricial $\exp(At)$. Verifica-se, no entanto, que $\nu(\exp, A) \geq t \|A\|_2$ pois

$$\nu(\exp, A) \geqslant \left\| \int_0^t e^{A(t-s)} e^{As} \, ds \right\|_2 \frac{\| A \|_2}{\| e^{At} \|_2} = t \, \| A \|_2 .$$

Se a matriz A for normal então a igualdade ocorre para todo t não-negativo [28]. Estas observações nos levam a concluir que neste caso o problema de computar a exponencial matricial é bem condicionado se a norma da matriz A não for muito grande.

O problema da sensibilidade e estimativas para $\nu(f,A)$ são encontrados em [11], [12] e [28]. Em [17] Rice desenvolve uma teoria geral de "condição".

I.6 - Normas matriciais

A norma de uma matriz quadrada A nxn é um número não-negativo $\| A \|$ que satisfaz as condições:

1 - $\| A \| > 0$ se $A \neq 0$ e $\| A \| = 0$ se $A=0$

2 - $\| cA \| = |c| \, \| A \|$

3 - $\| A + B \| \leqslant \| A \| + \| B \|$

4 - $\| AB \| \leqslant \| A \| \, \| B \|$

A partir da norma de vetores podemos obter normas matriciais definindo:

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

Decorrem desta definição as seguintes normas para uma matriz A de ordem n:

a) $\|A\|_1 = \max\limits_{j} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$ para $\|x\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$

b) $\|A\|_\infty = \max\limits_{i} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$ para $\|x\|_\infty = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i|$

c) $\|A\|_2 = (r(A^*A))^{1/2}$ para $\|x\|_2 = \sum\limits_{i=1}^{n} \left[|x_i|^2\right]^{1/2}$

onde $r(A) = \max \{|\mu| \ / \ \mu$ é autovalor de $A\}$ é o raio espectral da matriz A e A^* é a transposta conjugada de A.

Como ocorre com vetores, a convergência de uma seqüência de matrizes pode ser definida em termos de qualquer norma matricial, isto é, $A_k \to A$ se e somente se $\|A_k - A\| \to 0$.

Para uma consulta sobre normas matriciais indicamos [13] e [14].

II - EQUAÇÕES DIFERENCIAIS MATRICIAIS

II.1 - Introdução

A utilização de funções matriciais permite uma descrição simplificada das soluções de equações diferenciais. Diversos problemas surgidos em áreas como física, engenharia e biologia são descritos por equações diferenciais da forma

$$\dot{Y}(t) = A\,Y(t) + F(t) \qquad (1)$$

$$Y(0) = Y_o$$

$$\ddot{Y}(t) + D\,Y(t) = 0 \qquad (2)$$

$$Y(0) = Y_o$$

$$\dot{Y}(0) = \dot{Y}_o$$

$$\ddot{Y}(t) + B\,\dot{Y}(t) + C\,Y(t) = 0 \qquad (3)$$

$$Y(0) = Y_o$$

$$\dot{Y}(0) = \dot{Y}_o$$

onde $Y(t)$ e $F(t)$ são vetores do R^n e A, B, C e D são matrizes quadradas $n \times n$. As soluções são dadas de maneira análoga ao caso escalar por

$$Y(t) = e^{At}\,Y_o + \int_0^t e^{A(t-s)}\,F(s)\,ds \qquad (1)$$

$$Y(t) = \cos(\sqrt{D}\,t)\,Y_o + \frac{\operatorname{sen}(\sqrt{D}\,t)}{\sqrt{D}}\,\dot{Y}_o \qquad (2)$$

$$Y(t) = \left[\frac{B}{2}\, e^{-Bt/2}\, \frac{\mathrm{senh}(\sqrt{\Delta}\; t)}{\sqrt{\Delta}} + e^{-Bt/2}\, \cosh(\sqrt{\Delta}\; t)\right] Y_o + \qquad (3)$$

$$+\; e^{-Bt/2}\, \frac{\mathrm{senh}(\sqrt{\Delta}\; t)}{\sqrt{\Delta}}\, \dot{Y}_o \,,$$

onde $\Delta = (B^2 + 4A)/4$ e para (3) assume-se que $BC=CB$.

As funções matriciais envolvidas devem ser entendidas como séries de potências matriciais. Por exemplo,

$$\frac{\mathrm{sen}(\sqrt{D}\; t)}{\sqrt{D}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k\, D^k\, t^{2k+1}}{(2k+1)!}$$

As equações diferenciais acima são equações diferenciais de 1ª e 2ª ordem, com ou sem amortecimento.

Em geral, não estuda-se equações diferenciais lineares com coeficientes matriciais de ordem superior, por serem equivalentes a uma equação diferencial matricial linear de 1ª ordem cujo coeficiente é a matriz companheira. Contudo, esta matriz não possui uma estrutura simples que permita obter resultados próprios das equações de ordem superior.

Na seção II.2, apresentamos a solução dinâmica de uma equação diferencial matricial linear com coeficientes constantes homogênea de ordem m, e concluímos que a solução geral desta equação pode ser dada em termos apenas da solução dinâmica, de suas derivadas e dos coeficientes matriciais.

II.2 - A Solução Dinâmica

O estudo da equação diferencial matricial de ordem m

$$Y^{(m)}(t) = A_1 Y^{(m-1)}(t) + \ldots + A_{m-1} Y'(t) + A_m Y(t) \quad (4)$$

onde A_j, $j=1, 2, \ldots, m$, são matrizes de ordem n, reduz-se ao estudo de equações diferenciais de 1ª ordem.

Introduzindo uma nova variável

$$z = \begin{bmatrix} Y \\ Y' \\ \vdots \\ Y^{(m-1)} \end{bmatrix}$$

verificamos que a equação (4) é equivalente a equação matricial de 1ª ordem

$$\dot{z}(t) = A\, z(t) \quad (5)$$

onde

$$A = \begin{bmatrix} 0 & I & 0 & \ldots\ldots & 0 \\ 0 & 0 & I & \ldots\ldots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ A_m & A_{m-1} & A_{m-2} & \ldots & A_1 \end{bmatrix}$$

é a matriz companheira de ordem mn×mn, no sentido de que toda solução Y(t) de (4) define z(t) solução de (5) e reciprocamente, as n primeiras componentes de uma solução de (5) formam uma solução de (4).

Observando que

$$e^{At} = \begin{bmatrix} C_o(t) & C_1(t) & \cdots\cdots & C_{m-1}(t) \\ C_o'(t) & C_1'(t) & \cdots\cdots & C_{m-1}'(t) \\ \vdots & & & \vdots \\ C_o^{(m-1)}(t) & C_1^{(m-1)}(t) & \cdots & C_{m-1}^{(m-1)}(t) \end{bmatrix}$$

onde as matrizes $n \times n$ $C_j(t)$ são as soluções matriciais de (4) que satisfazem as condições iniciais

$$C_j^{(k)}(0) = \delta_{jk}\, I, \quad j,k = 0,\ 1,\ \ldots,\ m-1,$$

pois para $t = 0$, e^{At} se reduz a matriz identidade, e que a solução geral de (5) é $e^{At}z(0)$, obtemos que a solução geral da equação (4) é dada por

$$Y(t) = C_o(t)\ Y(0) + C_1(t)\ Y'(0) + \ldots + C_{m-1}(t)\ Y^{(m-1)}(0)$$

Desde que as soluções base $C_j(t)$ são funções inteiras, podemos escrever

$$C_j(t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_{kj} \frac{t^k}{k!} \qquad (6)$$

A partir de agora, a solução $C_{m-1}(t)$ será denotada como

$$C_{m-1}(t) = D(t) = \sum_{k=0}^{\infty} D_k \frac{t^k}{k!} \qquad (7)$$

e referida como sendo a <u>solução</u> <u>dinâmica</u> da equação (4).

Para uma interpretação física da solução dinâmica indicamos a referência [27] .

Por substituição direta de D(t) na equação diferencial, decorre que os coeficientes D_k satisfazem a equação matricial

$$D_{k+m} = A_1\, D_{k+(m-1)} + A_2\, D_{k+(m-2)} + \ldots + A_{m-1}\, D_{k+1} + A_m\, D_k$$

$$D_{k+m} = \sum_{i=0}^{m-1} D_{k+i}\, A_{m-i}, \qquad \text{para } k \geq 0 \qquad (8)$$

$$D_o = D_1 = D_2 = \ldots = D_{m-2} = 0$$

$$D_{m-1} = I$$

A propriedade de comutatividade, exp(At) A = A exp(A t), permite obter as relações

$$C_o'(t) = D(t)\, A_m \qquad (9)$$

$$C_{m-j}^{(m-j+1)}(t) = C_{m-j-1}^{(m-j)}(t) + D^{(m-j)}(t)\, A_j, \quad j=1,\ 2,\ \ldots, m-1$$

através da comparação das componentes diagonais.

Pela substituição sucessiva de j=m-1, m-2,...,2,1 nas relações acima obtemos

$$D^{(m)}(t) = \sum_{j=1}^{m} D^{(m-j)}(t)\, A_j \qquad (10)$$

Concluímos, então, que a solução dinâmica D(t) é uma solução a direita e a esquerda da equação (4) e além disso, resulta que

$$D^{(k+m)}(0) = D_{k+m} = \sum_{i=1}^{m} D_{k+m-i}\, A_i \qquad (11)$$

O próximo resultado justifica a afirmação de que a solução dinâmica D(t) carrega todas as informações sobre as soluções da equação diferencial em questão.

Teorema 1

Para todo j = 0, 1, 2, ..., m-1 temos que

$$C_j(t) = D^{(m-j-1)}(t) - \sum_{i=1}^{m-j-1} D^{(m-j-1-i)}(t)\ A_i \qquad (12)$$

A demonstração deste teorema é obtida por indução em j, através das relações (9) e (10).

Para j=0 temos que

$$C_o'(t) = D(t)\ A_m = D^{(m)}(t) - \sum_{i=1}^{m-1} D^{(m-i)}(t)\ A_i,$$

pois D(t) satisfaz a equação (4). Integrando ambos os lados da expressão acima entre 0 e t, e observando que $C_j^{(k)}(0) = \delta_{jk}\ I$, obtemos (12) para j=0.

Suponhamos que o resultado (12) seja válido para todo $j-1 < m-1$. Então

$$C_j^{(j+1)}(t) = C_{j-1}^{(j)}(t) + D^{(j)}(t)\ A_{m-j},$$

conforme a relação (9), pode ser escrito como

$$C_j^{(j+1)}(t) = D^{(m)}(t) - \sum_{i=1}^{m-j-1} D^{(m-i)}(t)\ A_i,$$

e o resultado do teorema segue integrando ambos os lados da expressão acima j+1 vezes entre 0 e t.

Este resultado permite escrever a solução geral de (4) em termos apenas da solução dinâmica. Além disso, obtemos a seguinte expressão para C_{kj}:

$$C_{kj} = \sum_{s=0}^{j} D_{k-j-1+s} A_{m-s} \qquad \text{para } k \geq m,\ j=0,\ 1,\ \ldots,m-1. \tag{13}$$

Para verificar esta relação, observamos que pelo teorema 1

$$C_{kj} = C_j^{(k)}(0) = D^{(m-j-1+k)}(0) - \sum_{i=1}^{m-j-1} D^{(m-j-1-i+k)}(0)\ A_i$$

Desde que $k-j-1 \geq 0$, utilizando a recorrência (8), mostramos que

$$C_{kj} = \sum_{s=0}^{m-1} D_{k-j-1+s} A_{m-s} - \sum_{i=1}^{m-j-1} D_{m-j-i-1+k} A_i .$$

Fazendo $i = m-s$, temos que

$$C_{kj} = \sum_{s=0}^{m-1} D_{k-j-1+s} A_{m-s} - \sum_{s=j+1}^{m-1} D_{k+s-j-1} A_{m-s}$$

$$C_{kj} = \sum_{s=0}^{j} D_{k-j+s-1} A_{m-s}$$

Informações mais detalhadas sobre a solução dinâmica podem ser encontradas em [21,22,24] Para um estudo de equações diferenciais matriciais indicamos [8] e [23] .

III - APROXIMAÇÃO DE RUNCKEL-PITTELKOW

III.1 - Introdução

Neste capítulo, estudamos de maneira breve novas representações para uma função matricial f(A) (seção III.4), extensão de uma função escalar analítica f(z), devidas a Runckel & Pittelkow. Estas representações são importantes pois não exigem o conhecimento dos autovalores da matriz A.

Na seção III.2, apresentamos a fórmula de Schwerdtfeger que foi utilizada para derivar as fórmulas de Runckel-Pittelkow.

O algoritmo de Faddev-Frame, que estabelece uma maneira prática para a determinação dos coeficientes do polinômio característico de uma matriz é encontrado na seção III.3.

Na seção III.5 é obtida uma expressão para a solução dinâmica (ver seção II.2) a partir das fórmulas de Runckel - Pittelkow.

III.2 - Fórmula de Schwerdtfeger

A fórmula de Schwerdtfeger [2], [25], para o cálculo da função matricial f(A) é desenvolvida a partir das covariantes de Fröbenius e suas propriedades, e é a base para a obtenção das fórmulas de Runckel-Pittelkow.

Consideremos uma função analítica f(z) e

$$c(z) = \prod_{i=1}^{s} (z-\mu_i)^{n_i}$$

o polinômio característico da matriz A de ordem n.

Da seguinte decomposição em frações parciais

$$\frac{1}{c(z)} = \sum_{j=1}^{s} \frac{p_j(z)}{(z - \mu_j)^{n_j}}$$

define-se os polinômios

$$g_j(z) = \frac{p_j(z)c(z)}{(z - \mu_j)^{n_j}} = p_j(z) \prod_{i \neq j} (z - \mu_i)^{n_i}$$

As matrizes $A_j = g_j(A)$ são chamadas covariantes de Fröbenius e satisfazem as seguintes identidades [2], [25] :

$$\begin{aligned}
&A_1 + A_2 + \ldots + A_s = I \\
&(A - \mu_j I)^k A_j = 0 \quad , \quad k \geq n_j \\
&A_i A_j = 0 \quad , \quad i \neq j \\
&A_j^2 = A_j
\end{aligned}$$

As duas primeiras propriedades caracterizam as covariantes de Fröbenius no sentido de que o único conjunto de s matrizes que as satisfaz é $\{A_j,\ j=1,\ldots,s\}$.

Utilizando as covariantes de Fröbenius e as propriedades citadas acima obtém-se a seguinte expressão, conhecida por fórmula de Schwerdtfeger, para o cômputo da função matricial:

$$f(A) = \sum_{j=1}^{s} A_j \sum_{k=0}^{n_j-1} \frac{f^{(k)}(\mu_j)(A - \mu_j I)^k}{k!}$$

As matrizes $z_{jk} = (A - \mu_j I)^k A_j$ são conhecidas como matrizes constituintes.

III.3 - O algoritmo de Faddev-Frame

Os coeficientes c_r do polinômio característico

$$c(z) = \prod_{i=1}^{s} (z - \mu_i)^{n_i} = \sum_{r=0}^{n} c_{n-r}\, z^r$$

de uma matriz A de ordem n podem ser calculados através do algoritmo de Faddev-Frame [2], [25] :

Define-se os polinômios

$$h_r(z) = \sum_{s=0}^{r} c_{r-s}\, z^s \quad , \text{ tais que } h_r(z) = z\, h_{r-1}(z) + c_r I$$

que satisfazem $h_o = c_o = 1$ e $h_n(z) = c(z)$.
Obtém-se então polinômios matriciais

$$h_r(A) = \sum_{s=0}^{r} c_{r-s}\, A^s$$

tais que $h_o(A) = I$ e $h_n(A) = c(A) = 0$, devido ao teorema de Cayley-Hamilton. Além disso, a matriz adjunta $\mathrm{adj}(\mu I - A)$ satisfaz

$$\mathrm{adj}(\mu I - A) = \sum_{r=0}^{n-1} h_{n-r-1}(\mu) A^r = \sum_{r=0}^{n-1} \mu^r\, h_{n-r-1}(A)$$

As fórmulas recursivas de Faddev-Frame para a determinação dos coeficientes do polinômio característico e das matrizes $h_r(A)$ são:

$$c_r = - \frac{\text{traço } A\, h_{r-1}(A)}{r} \quad , \quad r = 1,\ldots\ldots,n \;;\; c_o = 1$$

$$h_r(A) = A\, h_{r-1}(A) + c_r I \quad , \quad r = 1,\ldots\ldots,n \;;\; h_o(A) = I;$$
$$h_n(A) = 0$$

Desta maneira, conhecendo a matriz $h_{r-1}(A)$ obtemos pela primeira expressão o coeficiente c_r. A partir de c_r e $h_{r-1}(A)$ calculamos $h_r(A)$ através da segunda expressão. Assim, os coeficientes do polinômio característico e as matrizes $h_r(A)$ são encontrados indutivamente iniciando com $h_o(A) = I$.

III.4 - Fórmulas de Runckel-Pittelkow

A vantagem destas fórmulas para o cálculo de funções matriciais sobre as anteriormente apresentadas é que não exigem o conhecimento dos autovalores da matriz considerada.

Seja A uma matriz de ordem n e

$$c(z) = \sum_{r=0}^{n} c_{n-r}\, z^r = \prod_{i=1}^{s} (z - \mu_i)^{n_i}$$

o polinômio característico de A.

Consideremos uma função escalar analítica f(z) para $|z| < L$, onde L é maior que o raio espectral r(A)

$$r(A) = \max_{1 \leq i \leq s} \{ |\mu_i| \;/\; \mu_i \text{ é autovalor de A} \}$$

Então, temos as seguintes expressões para a função matricial

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)dz}{(\mu I - A)}$$

devido a Runckel & Pittelkow [2], [25] :

$$f(A) = \sum_{v=n}^{\infty} d_v \left[\frac{f(z)\ \mathrm{adj}(zI - A)}{(v-1)!}\right]_{z=0}^{(v-1)} \qquad (1)$$

$$f(A) = \sum_{r=0}^{n-1} A^r \sum_{s=r+1}^{n} c_{n-s} \sum_{v=n+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}\ f^{(v)}(0)}{v!} \qquad (2)$$

$$f(A) = \sum_{r=0}^{n-1} h_r(A) \sum_{v=r}^{\infty} \frac{d_{v+n-r}}{v!} f^{(v)}(0) \qquad (3)$$

$$f(A) = \sum_{r=0}^{n-1} A^r \left[\frac{f^{(r)}(0)}{r!} - \sum_{s=0}^{r} c_{n-s} \sum_{v=n+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}\ f^{(v)}(0)}{v!}\right] \qquad (4)$$

onde c_k é o k-ésimo coeficiente do polinômio caracteristico de A, $h_r(A)$ é a matriz descrita na seção anterior e d_v são os coeficientes da série de Laurent de

$$\frac{1}{c(z)} = \sum_{v=n}^{\infty} \frac{d_v}{z^v}$$

calculados por

$$d_v = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{dz}{c(z)\ z^{1-v}}$$

desde que $1/c(z)$ é analítica em todo z que não é autovalor de A.

Os coeficientes d_v, para $v = n, n+1, n+2, \ldots$ podem ser calculados recursivamente. Como o coeficiente c_0 do termo z^n no polinômio característico é igual a 1, temos que $d_n=1$. Os de-mais d_v são obtidos através de aplicações sucessivas da fórmula [2], [25]

$$d_v = - \sum_{s=1}^{n} c_s \, d_{v-s} \qquad (5)$$

adotando que $d_v = 0$ para $v < n$.

Além disso, os seguintes limites superiores para os d_v são obtidos por indução em v

Seja $a = \sum_{s=1}^{n} |c_s|$

Então, $d_v \leq a^{v-n}$ para $v \geq n$, se $a \geq 1$;

$|d_{nv+p}| \leq a^v < 1$ para $1 \leq p \leq n$ e $v > 0$, se $a < 1$.

Através do truncamento das séries envolvidas nas fórmulas de Runckel-Pittelkow, obtemos então aproximações do tipo polinomial para funções matriciais. Um estudo mais detalhado sobre este assunto, bem como algumas de suas aplicações, é encontrado em [2], [25] .

III.5 - Representação da Solução Dinâmica em Termos das Fórmulas de Runckel-Pittelkow

Observamos que a solução dinâmica de uma equação diferencial matricial linear homogênea de ordem m (conforme II.2) pode ser obtida a partir da exponecial da matriz companheira A da seguinte maneira:

$$D(t) = [I\ 0\ \dots\ 0]\ e^{At} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ I \end{bmatrix}$$

já que a solução dinâmica D(t) é a matriz nxn que ocupa a posição dada pela linha 1 e coluna m da matriz exp(At).

Utilizando as fórmulas (2) e (4) de Runckel-Pittelkow para exp(At) obtemos

$$e^{At} = \sum_{r=0}^{N-1} A^r\ t^r \sum_{s=r+1}^{N} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}}{v!}\ t^v$$

$$e^{At} = \sum_{r=0}^{N-1} A^r \left[\frac{t^r}{r!} - \sum_{s=0}^{r} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}\ t^v}{v!}\right]$$

onde N=mn é o grau do polinômio característico

$$c(z) = \sum_{r=0}^{N} c_{N-r}\ z^r$$

da matriz companheira A e os coeficientes d_v são tais que

$$\frac{1}{c(z)} = \sum_{v=N}^{\infty} \frac{d_v}{z^v}$$

para z suficientemente grande.

Denotamos por $A_{ij}^{(r)}$ $(1 \leq i,j \leq m)$ as componenentes matriciais de ordem n da matriz A^r. Decorre da observação feita a cima e das expressões para exp(At) que a solução dinâmica é representada por:

$$D(t) = \sum_{r=0}^{N-1} A_{1m}^{(r)}\ t^r \sum_{s=r+1}^{N} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}}{v!}\ t^v \qquad (6)$$

$$D(t) = \sum_{r=0}^{N-1} A_{1m}^{(r)} \left[\frac{t^r}{r!} - \sum_{s=0}^{r} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}}{v!} t^v \right] \quad (7)$$

Por outro lado,

$$A^r = \frac{d^r e^{At}}{dt^r} = \begin{bmatrix} C_o^{(r)}(0) & C_1^{(r)}(0) & \dots & C_{m-1}^{(r)}(0) \\ C_o^{(r+1)}(0) & C_1^{(r+1)}(0) & & C_{m-1}^{(r+1)}(0) \\ \vdots & & & \vdots \\ C_o^{(m-1+r)}(0) & & \dots & C_{m-1}^{(m-1+r)}(0) \end{bmatrix} \quad (8)$$
$$(\text{em } t=0)$$

Segue que $A_{ij}^{(r)} = C_{j-1}^{(r+i-1)}(0)$, onde as matrizes $C_o(t)$, $C_1(t)$, ..., $C_{m-1}(t)$ são as m soluções matriciais de

$$Y^{(m)}(t) = A_1\, Y^{(m-1)}(t) + \dots + A_{m-1} Y'(t) + A_m\, Y(t)$$

que satisfazem as condições inicais

$$C_j^{(k)}(0) = \delta_{jk}\, I, \quad j,k = 0,\ 1,\ \dots,\ m-1,$$

conforme o apresentado na seção II.2.

Desta forma verificamos que

$$A_{1m}^{(r)} = C_{m-1}^{(r)}(0) = D^r(0) = D_r.$$

Como $D_o = D_1 = D_2 = \dots = D_{m-2} = 0$, decorre verdadeiro o seguinte teorema.

<u>Teorema</u>

Suponhamos que $c(z) = \sum_{r=0}^{N} c_{N-r}\, z^r$ $(N = mn)$ seja o polinômio característico da matriz companheira A (conforme a seção II.2). Então, a solução dinâmica D(t) possui as seguintes expressões:

$$D(t) = \sum_{r=m-1}^{N-1} D_r \, t^r \sum_{s=r+1}^{N} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}}{v!} t^v \qquad (9)$$

$$D(t) = \sum_{r=m-1}^{N} D_r \left[\frac{t^r}{r!} - \sum_{s=0}^{r} c_{N-s} \sum_{v=N+r-s}^{\infty} \frac{d_{v+s-r}}{v!} t^v \right] \qquad (10)$$

onde $D_r = \left.\dfrac{d^r D(t)}{dt^r}\right|_{t=0}$ e os coeficientes d_v são tais que

$$\frac{1}{c(z)} = \sum_{v=N}^{\infty} \frac{d_v}{z^v}$$

para z suficientemente grande e que podem ser calculados por (5).

III.5.1 - Cômputo dos Coeficientes C_k do Polinômio Característico da Matriz companheira pelo Algoritmo de Faddev--Frame

Consideremos

$$c(z) = \prod_{i=1}^{s} (z-\mu_i)^{n_i} = \sum_{r=0}^{N} c_{N-s} \, z^r$$

o polinômio característico da matriz companheira A, de grau N, N = mn, e os polinômios

$$h_r(z) = \sum_{s=0}^{r} c_{r-s} \, z^s .$$

Pelo algoritmo de Faddev-Frame (III.3),

$$c_r = - \frac{\text{traço de } A\, h_{r-1}(A)}{r}, \qquad r = 1, 2, \ldots, N;$$

$$h_r(A) = A\, h_{r-1}(A) + c_r\, I, \qquad r = 1, 2, \ldots, N;$$

onde $c_o = 1$, $h_o = I$ e $h_N(A) = 0$.

Como

$$h_{r-1}(A) = \sum_{s=0}^{r-1} c_{r-1-s}\, A^s ,$$

decorre que

$$A\, h_{r-1}(A) = \sum_{s=0}^{r-1} c_{r-1-s}\, A^{s+1} = \sum_{s=1}^{r} c_{r-s}\, A^s .$$

Resulta então que

$$r\, c_r = -\, \text{traço}\, (A\, h_{r-1}(A))$$

$$r\, c_r = -\, \text{traço}\, \Big(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\, A^j\Big)$$

$$r\, c_r = - \sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\, \text{traço}\, (A^j).$$

O traço da matriz A^j é igual a soma dos traços das suas componentes matriciais diagonais $A_{ij}^{(j)}$. Assim,

$$r\, c_r = -\, \text{traço}\, \Big(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j} \sum_{i=1}^{m} A_{ii}^{(j)}\Big).$$

Utilizando a relação $A_{ij}^{(r)} = C_{j-1}^{(r+i-1)}(0)$, obtida na seção anterior, para $A_{ii}^{(j)}$ temos

$$r\,c_r = -\text{ traço }\left(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\sum_{i=1}^{m} C_{i-1}^{(j+i-1)}(0)\right),\quad r=1,2,\ldots,N,$$

onde (conforme expressão 13 do capítulo II)

$$C_{i-1}^{(j+i-1)}(0) = \begin{cases} 0 & \text{se } i+j \leq m \\ \sum_{s=0}^{i-1} D_{j-1+s}\,A_{m-s} & \text{se } i+j > m, \end{cases}$$

para $j = 1, 2, \ldots, r$ e $i = 1, 2, \ldots, m$.

Exemplo

Consideremos a equação matricial $\ddot{Y} = A_1\,\dot{Y} + A_2\,Y$. Neste caso temos que

$$r\,c_r = -\text{ traço }\left(\sum_{j=1}^{r}\sum_{i=1}^{2} c_{r-j}\,C_{i-1}^{(i+j-1)}(0)\right),\quad r=1,2,\ldots,2n$$

$$r\,c_r = -\text{ traço }\left(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\,(C_o^{(j)}(0) + C_1^{(j+1)}(0)\right),$$

onde

$$C_o^{(j)}(0) = \begin{cases} 0 & \text{se } j \leq 1 \\ D_{j-1}\,A_2 & \text{se } j > 1 \end{cases}$$

$$C_1^{(j+1)}(0) = D_{j-1}\,A_2 + D_j\,A_1 \quad \text{para } j = 1, 2, \ldots, r.$$

Logo,

$$r\,c_r = -\text{ traço }\left(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\,D_{j-1}\,A_2 + \sum_{j=1}^{r} c_{r-j}\,(D_{j-1}\,A_2 + D_j\,A_1)\right)$$

$$r\, c_r = -\, \text{traço} \left(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j} \, (2\, D_{j-1}\, A_2 + D_j\, A_1) \right),$$

pois $D_o = 0$. Portanto,

$$r\, c_r = -\, \text{traço} \left(\sum_{j=1}^{r} c_{r-j} \, (2\, D_{j+1} - D_j\, A_1) \right),$$

pois $D_{j+1} = D_{j-1}\, A_2 + D_j\, A_1$ (conforme a relação de recorrência 11 da seção II.2).

IV-OUTROS MÉTODOS

IV.1 - Introdução

Existem muitas maneiras de computar funções matriciais. Moler e Van Loan em [12] analisam e classificam dezenove métodos para computar a exponencial matricial.

Neste capítulo, apresentamos sucintamente três métodos para computar funções matriciais.

Na seção IV.2 encontramos um método de aproximação, no sentido de que aproximamos a função matricial desejada f(A) pela função matricial g(A), se g(z) aproximar f(z) sobre o espectro da matriz A. Este é o método dos aproximantes de Padé . Em IV.2.2 estão algumas referências sobre o caso particular da exponencial matricial.

Outra classe de métodos é baseada em decomposição matricial. Na seção IV.3 comentamos os métodos de diagonalização e triangularização.

IV.2 - Aproximantes de Padé

Este método para computar funções matriciais é baseado na idéia que se g(z) aproxima f(z) sobre o espectro da matriz A, então g(A) aproxima f(A). Com este objetivo faremos um breve estudo dos aproximantes de Padé.

Consideremos uma função f(z) com expansão em série de Taylor

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$$

Aproximantes de Padé para a função f(z) são aproximações racionais da forma

$$P_{lm}(z) = \frac{R_l(z)}{Q_m(z)} \qquad (1)$$

onde $R_l(z)$ e $Q_m(z)$ são polinômios com graus menores ou iguais a l e m, respectivamente, primos entre si. Além disso, $Q_m(0)=1$.

Os coeficientes de $R_l(z)$ e $Q_m(z)$ são determinados pela equação

$$f(z) - \frac{R_l(z)}{Q_m(z)} = O(z^{l+m+1})$$

de maneira que os l+m+1 primeiros termos na expansão em série de Taylor de $P_{lm}(z)$ igualam os l+m+1 primeiros termos na expansão de f(z).

Escrevendo $R_l(z) = a_o + a_1 z + \ldots + a_l z^l$ e $Q_m(z) = 1 + b_1 z + \ldots + b_m z^m$ verifica-se que $P_{lm}(z)$ é um aproximante de Padé se

$$\begin{aligned} c_o &= a_o \\ c_1 + c_o b_1 &= a_1 \\ c_2 + c_1 b_1 + c_o b_2 &= a_2 \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \qquad (2)$$

$$
\begin{aligned}
& c_l + c_{l-1}b_1 + \dots + c_1 b_{l-1} + c_o b_l = a_l \\
& c_{l+1} + c_l b_1 + \dots\dots\dots + c_{l-m+1} b_m = 0 \\
& \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
& c_{l+m} + c_{l+m-1} b_1 + \dots\dots\dots + c_l b_m = 0
\end{aligned}
$$

onde $b_i = 0$ se $i > m$ e $c_i = 0$ se $i < 0$.

Ou seja, os coeficientes $b_1, b_2, \dots, b_m$ podem ser calculados resolvendo o sistema

$$Cb = d \tag{3}$$

onde

$$
C = \begin{bmatrix}
c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l-1} & c_l \\
c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_l & c_{l+1} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m-2} & c_{l+m-1}
\end{bmatrix}
$$

$$
b = \begin{bmatrix} b_m \\ \vdots \\ b_1 \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad d = \begin{bmatrix} c_{l+1} \\ \vdots \\ c_{l+m} \end{bmatrix}
$$

ou resolvendo o sistema

$$T\tilde{b} = d$$

onde

$$
T = \begin{bmatrix}
c_l & c_{l-1} & \cdots & c_{l-m+2} & c_{l-m+1} \\
c_{l+1} & c_l & \cdots & c_{l-m+3} & c_{l-m+2} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
c_{l+m-1} & c_{l+m-2} & \cdots & c_{l+1} & c_l
\end{bmatrix}
$$

e

$$\tilde{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

e os coeficientes a_o, a_1, ..., a_l são dados por

$$a_j = \sum_{i=0}^{j} c_{j-i} b_i \quad , \qquad 0 \leq j \leq l \qquad \text{e } b_i = 0 \text{ para } i > m.$$

Os métodos de Hankel e Toeplitz são métodos rápidos de inversão das matrizes C e T, respectivamente, e uma descrição destes métodos pode ser encontrada em [7] .

Denotaremos por (l/m) o aproximante de Padé $P_{lm}(z)$.

Os aproximantes de Padé são dispostos em um arranjo chamado tabela de Padé, da seguinte maneira:

$$\begin{matrix} (0/0) & (0/1) & (0/2) & \dots \\ (1/0) & (1/1) & (1/2) & \dots \\ (2/0) & (2/1) & (2/2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{matrix}$$

A primeira coluna da tabela é a coluna das somas parciais da série de Taylor de f(z), e a seqüência (0/0), (1/1) , (2/2), ... é chamada seqüência diagonal. Um estudo da tabela Padé é feito por Baker [1] .

Uma observação a ser feita é que nem sempre existem os aproximantes de Padé. Por exemplo, tomemos

$$f(z) = \frac{z^2 - z + 1}{1 - z} = 1 + z^2 + z^3 + \dots\dots \text{ para } |z| < 1.$$

Então

$$(1/1) = \frac{a_o + a_1 z}{1 + b_1 z}$$

não existe para esta função pois a equação (1) não é satisfeita

Uma condição suficiente para a existência de um aproximante de Padé $P_{lm}(z)$ é

$$c(l/m) = \det \begin{bmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l-1} & c_l \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m-2} & c_{l+m-1} \end{bmatrix} \neq 0$$

devido à (3).

Teorema 1

Se existe o (l/m) aproximante de Padé, então é único [1].

Dizemos que uma seqüência de aproximantes de Padé é normal se todos os elementos da seqüência existem e são diferentes.

Um texto básico sobre aproximantes de Padé é [1]

IV.2.1 - Relação entre aproximantes de Padé e frações contínuas

Aproximantes de Padé são aproximações racionais para a função

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i$$

Uma outra maneira de aproximar $f(z)$ é através de frações contínuas.

Uma fração contínua é uma seqüência infinita de frações cujo N+1 termo é da forma

$$F_N(z) = \frac{A_N(z)}{B_N(z)} = \cfrac{c_0}{1+\cfrac{c_1 z}{1+\cfrac{c_2 z}{1+\ddots \cfrac{c_{N-1} z}{1+c_N z}}}} \tag{4}$$

Os coeficientes c_n são determinados expandindo a fração contínua $F_N(z)$ em série de Taylor e comparando os coeficientes desta série com aqueles da série de $f(z)$.

As relações de recorrência a seguir, permitem desenvolver fórmulas explícitas para o numerador $A_N(z)$ e para o denominador $B_N(z)$.

Para $N = 1, 2, \ldots,$ A_N e B_N satisfazem [14]

$$\begin{aligned} A_{N+1}(z) &= A_N(z) + c_{N+1} z A_{N-1}(z) \\ B_{N+1}(z) &= B_N(z) + c_{N+1} z B_{N-1}(z) \end{aligned} \tag{5}$$

onde $A_o = c_o = A_1$, $B_o = 1$, $B_1 = 1 + c_1 z$.

O resultado a seguir relaciona aproximantes de Padé e frações contínuas

Teorema 2

Se a seqüência de aproximantes de Padé (0/0), (0/1), (1/1), (1/2), (2/2), (2/3),.... for normal então seu (N+1) termo tem a representação em fração contínua $F_N(z)$ (4) onde os coeficientes c_n (n = 0, 1,...) são os mesmos para cada termo da seqüência [14] .

Este resultado segue das seguintes observações [14]

1 - Se N = 2M for par então $F_N(z)$ é o quociente de dois polinômios de grau M, enquanto que se N = 2M+1 é ímpar então $F_N(z)$ é o quociente de um polinômio de grau M por um polinômio de grau M+1.

2 - Se $F_N(z)$ for expandida em série de Taylor, então o coeficiente de z^p depende somente de c_o, c_1, ..., c_p. Resulta que os N+1 primeiros termos na expansão em série de Taylor de $F_N(z)$ igualam os N+1 primeiros termos na expansão de f(z) e que c_p depende somente de a_o, a_1,...,a_p e não depende de N.

Em [14] é apresentado um eficiente procedimento para calcular os coeficientes da fração contínua (4) bem como um estudo da convergência dos aproximantes de Padé.

Vários métodos para calcular aproximentes de Padé são analisados e apresentados em [7] .

IV.2.2 - Aproximantes de Padé para a exponencial matricial

Para a função exponencial exp(z), o (p/q) aproximante de Padé pode ser escrito como [9]

$$R_{pq}(z) = \frac{N_{pq}(z)}{D_{pq}(z)}$$

onde

$$N_{pq}(z) = \sum_{j=0}^{p} \frac{(p+q-j)!p!z^j}{(p+q)!j!(p-j)!}$$

$$D_{pq}(z) = \sum_{j=0}^{q} \frac{(p+q-j)!q!(-z)^j}{(p+q)!j!(q-j)!}$$

e o (p/q) aproximante de Padé para a exponencial matricial exp(A) é definido por

$$R_{pq}(A) = N_{pq}(A)\ (D_{pq}(A))^{-1}$$

A não singularidade de $D_{pq}(A)$ é assegurada se p e q são suficientemente grandes ou se os autovalores da matriz A são negativos [12] . Erros devido a cancelamento e o possível mal condicionamento com respeito à inversão de $D_{pq}(A)$ são problemas encontrados neste método.

Apresentaremos a seguir algumas referências que tratam da aproximação da exponencial matricial por aproximantes de Padé e um breve resumo dos seus conteúdos.

Está estabelecido que a exponencial de uma matriz pode ser aproximada por várias seqüências de aproximantes de Padé. Varga (1961) provou que aproximantes de Padé para a função exponencial exp(z) fornecem aproximações convergentes para exp(A) quando A é hermitiana e fez uma análise do erro ocorrido. Fair & Luke (1970) provaram que aproximações matriciais correspondentes aos aproximantes de Padé (n/n) e (n-1/n) são convergentes para matrizes quaisquer e desenvolveram uma estimativa para o erro cometido nestas aproximações.

Wragg & Davies [32] estabeleceram que várias seqüências de aproximantes de Padé para exp(z) dão aproximações satisfatórias para exp(A).

Em [34], Wragg e Davies (1975) consideram problemas envolvidos no uso de (n/n) aproximantes de Padé para computar numericamente exponenciais matriciais. Programas computacionais incorporando as idéias apresentadas neste artigo foram escritos, e detalhes destes programas, juntamente com a demostração de suas eficiências, são fornecidos por Wragg & Davies [33].

Uma majoração para o erro teórico ocorrido na aproximação da exponencial matricial por um (n/n) aproximante de Padé é encontrada também em [19].

Van Loan [29] analisa os efeitos da não-normalidade de uma matriz sobre os aproximantes de Padé para a exponencial matricial. Explorando a propriedade da exponencial, $e^A=(e^{A/m})^m$, apresenta uma nova família de aproximações para exp(A), a saber, $F(A,p,q,j) = (R_{pq}(A/2^j))^{2^j}$. Informações sobre estas aproximações são encontradas também em [6] e [12].

IV.3 - Decomposição matricial

Os métodos de decomposição matricial são baseados nas transformações de similaridade da forma $A = PBP^{-1}$. Neste caso (ver seção I.3), $f(A) = Pf(B)P^{-1}$. A utilização da forma canônica de Jordan, $A = PJP^{-1}$, não é conveniente do ponto de vista computacional (a menos que a matriz A seja diagonalizável com uma matriz de autovetores bem condicionada), pois um erro de arredondamento pode transformar autovalores múltiplos em autovalores distintos, ou vice-versa, alterando completamente a estrutura de J e P. Uma discussão das dificuldades para computar a forma canônica de Jordan é feita por Golub & Wilkinson [5] e Kagstrom & Ruhe [10].

IV.3.1 - Diagonalização

Se a matriz A for diagonalizável com autovalores μ_1, ..., μ_n então podemos tomar como P a matriz cujas colunas são os autovetores de A. Decorre que AP = PD, onde $D=diag(\mu_1,..,\mu_n)$ e $f(A)=Pf(D)P^{-1}$.

Na prática, dificuldades ocorrem quando A é "quase" não-diagonalizável, isto é, quando pequenas modificações a tornam não-diagonalizável. Neste caso, $cond(P)=\|P\|\ \|P^{-1}\|$ é grande e quaisquer erros cometidos (por exemplo, no cômputo dos autovalores) podem ser multiplicados no resultado final por cond(P) [12].

Uma melhoria na eficiência (quantidade de tempo de computação) e confiabilidade deste método pode ser obtida quando os autovetores são computados pelo algoritmo QR [31].

A idéia é utilizar subrotinas ORTHES e HQR2 [26] para achar matrizes Q ortogonal ($Q^{-1}=Q^t$), D diagonal, e R quase-triangular (no caso de todos os autovalores serem reais R é triangular superior) tais que

$$AQR = QRD$$

Observemos que estas subrotinas computam a matriz dos autovetores P através da sua decomposição P = QR.

Para computar P^{-1} resolve-se o sistema $RY = Q^t$.

Então $P^{-1} = Y$ e $f(A) = Pf(D)P^{-1}$.

A maior vantagem desta modificação é que torna-se possível dar uma estimativa para cond (P).

Para maiores detalhes consultar [12].

IV.3.2 - Triangularização

Uma outra transformação de similaridade é a decomposição de Schur de uma matriz.

Qualquer matriz A pode ser fatorada em $A = PTP^*$ onde P é uma matriz unitária ($P^{-1}=P^*$=transposta conjugada de P) e T é uma matriz triangular superior. Se a matriz A for real, então P pode ser tomada real ($P^{-1}=P^t$) e T é real e bloco-triangular superior.

A decomposição de Schur pode ser computada pelas sub-rotinas ORTHES e uma versão HQR2 [26]. Necessita-se então de algoritmos para computar f(T) onde T é uma matriz triangular superior ou quase-triangular superior. Este é o objetivo de Parlett [16]. Parlett mostra como computar recursivamente a parte triangular estritamente superior da matriz f(T) a partir das duas propriedades seguintes:

1 - Se T é bloco triangular superior então f(T) também é e possui a mesma estrutura de blocos.

2 - $f(T)T = Tf(T)$.

Este método para computar funções matriciais, bem como as dificuldades que apresenta, é encontrado também em [6], [11], [12] e [15]. Tais dificuldades surgem quando a matriz A possui autovalores múltiplos ou quase confluentes, sendo prudente então usar uma versão modificada do algoritmo.

V - PROGRAMA PARA COMPUTAR A EXPONENCIAL MATRICIAL VIA FÓRMULA DE RUNCKEL & PITTELKOW

V.1 - Introdução

Segundo Runckel & Pittelkow, a exponencial matricial é dada por (seção III.4)

$$\exp(A) = \sum_{r=0}^{n-1} h_r(A) \sum_{v=r}^{\infty} \frac{d_{v+n-r}}{v!}$$

Neste programa, através do truncamento da série na expressão acima, aproximamos a exponencial matricial por

$$\exp(A) \approx \sum_{r=0}^{n-1} h_r(A) \sum_{v=r}^{k_2} \frac{d_{v+n-r}}{v!}$$

Utilizamos para este fim o microcomputador Nexus 1600, compatível com o IBM PC. Os dados de entrada são a matriz A, a ordem n da matriz e o número de termos k_2 na série truncada. Definimos

$$S_1(r) = \sum_{v=r}^{k_2} \frac{d_{v+n-r}}{v!} \qquad \text{para } r=0,\ldots,n-1$$

$$S = S(A) = \sum_{r=0}^{n-1} h_r(A) S_1(r)$$

$$d(v) = \frac{d_{n+v}}{v!} \qquad \text{para } S_1(0) \text{ e } v=0,\ldots,k_2$$

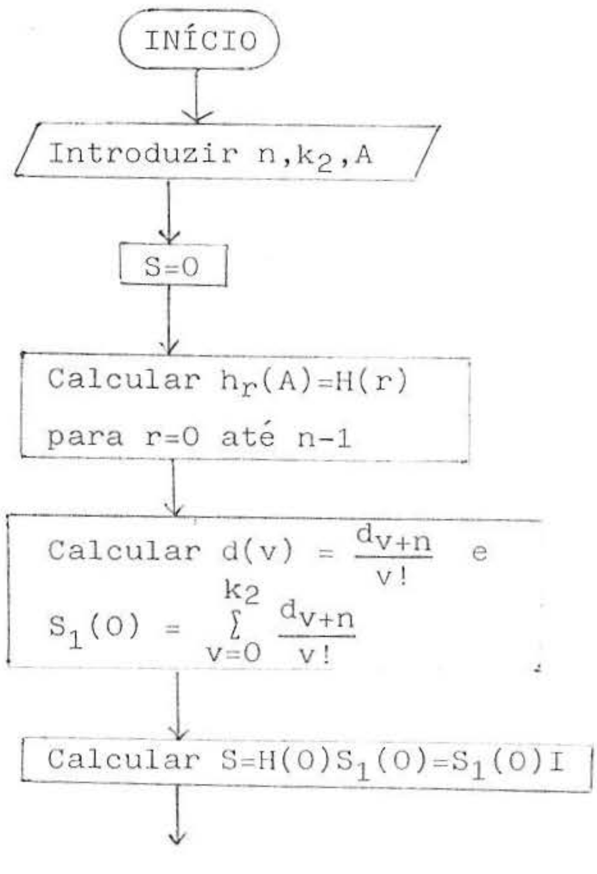
$$d(v) = \frac{d(v)(\text{anterior})}{v+r} \qquad \text{para } S_1(r),\ r=1,\ldots,n-1 \text{ e } v=r,\ldots,k_2.$$

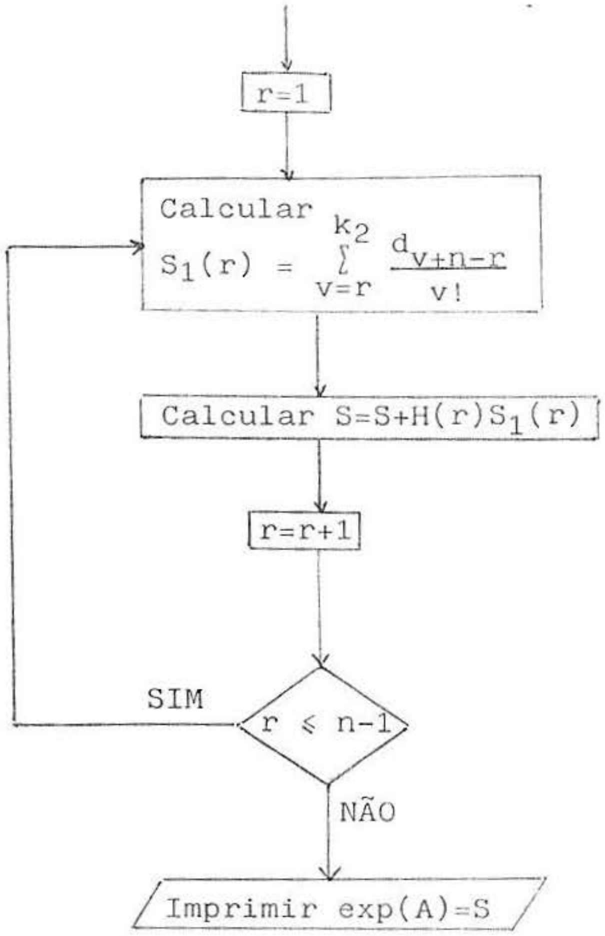
Devemos observar que a dimensão do vetor D no programa deve ser no mínimo igual ao número de termos k_2. Portanto , se fixarmos a dimensão de D, k_2 não poderá ultrapassar esta dimensão. Se definirmos a dimensão de D em função do número de termos k_2 então a cada nova aproximação necessitaremos reiniciar o programa.

Alterações que aperfeiçoariam o programa seriam a introdução de um critério de parada e o armazenamento de dados que dispensariam o cálculo de todas as somas S e $S_1(r)$ a cada nova aproximação.

A listagem do programa é encontrada no apêndice.

V.2 - Fluxograma





V.3 - Matrizes circulantes

Para testar o programa desenvolvido utilizamos algumas matrizes com exponencial matricial conhecida, e em especial matrizes circulantes por apresentarem a propriedade de serem diagonalizadas por uma mesma matriz. Apresentamos a seguir um resumo da teoria de matrizes circulantes.

Uma matriz circulante de ordem n, ou circulante, é uma matriz da forma

$$C = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} & c_n \\ c_n & c_1 & \cdots & c_{n-2} & c_{n-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_2 & c_3 & \cdots & c_n & c_1 \end{bmatrix}$$

Observemos que um circulante é determinado pela primeira linha e que cada linha é obtida da anterior por uma translação à direita. Toda matriz circulante é diagonalizável satisfazendo

$$C = F^*P(D)F$$

com $P(z) = \sum_{k=0}^{n-1} c_{k+1}z^k$ um polinômio que depende de $c_1, c_2, \ldots, c_n$;

$D = \mathrm{diag}(1, w, \ldots, w^{n-1})$ uma matriz diagonal onde $w = \exp(2\Pi i/n)$;

F a matriz de Fourier definida por

$F = (a_{kj}) = \frac{1}{\sqrt{n}} (\overline{w}^{(k-1)(j-1)})$;

F^* a transposta conjugada de F.

Explicitamente, F^* é dada por

$$F^* = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & w & w^2 & \cdots & w^{n-1} \\ 1 & w^2 & w^4 & \cdots & w^{(n-1)2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & w^{n-1} & w^{(n-1)2} & \cdots & w^{(n-1)(n-1)} \end{bmatrix}$$

Como a seqüência w^k , $k=0,1,\ldots$ é periódica, temos

$$F^* = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & w & w^2 & \dots & w^{n-1} \\ 1 & w^2 & w^4 & \dots & w^{n-2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & w^{n-1} & w^{n-2} & \dots & w \end{bmatrix}$$

Da decomposição $C=F^*P(D)F$, observamos que os autovalores do circulante C são dados por

$$\mu_i = P(w^{i-1}) \quad , \quad i=1,2,\dots,n.$$

A importância da decomposição $C=F^*P(D)F$ reside no fato de P(D) ser uma matriz diagonal (ver seção I.3) e F uma matriz unitária cuja inversa é simplesmente sua transposta conjugada.

Matrizes circulantes são discutidas em [13] e [20] .

V.4 - Matrizes usadas para testar o programa logicamente

1- $$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \exp(A) = \begin{bmatrix} e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e \end{bmatrix}$$

2- $$A = \begin{bmatrix} -49 & 24 \\ -64 & 31 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -17 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}^{-1}$$

portanto,

$$\exp(A) = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-1} & 0 \\ 0 & e^{-17} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}^{-1}$$

$$\exp(A) \approx \begin{bmatrix} -0.735759 & 0.551819 \\ -1.471518 & 1.103638 \end{bmatrix}$$

<u>Circulantes 2x2</u>

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix}$$

$w = -1 \quad ; \quad A = F^*P(D)F \qquad$ onde

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad P(D)=aI+bD = \begin{bmatrix} a+b & 0 \\ 0 & a-b \end{bmatrix} \qquad F^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

portanto, $\exp(A) = F^*\exp(P(D))F$

$$\exp(A) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{a+b} + e^{a-b} & e^{a+b} - e^{a-b} \\ e^{a+b} - e^{a-b} & e^{a+b} + e^{a-b} \end{bmatrix}$$

3- $A = \begin{bmatrix} 1 & -3 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} \qquad \exp(A) \approx \begin{bmatrix} 27.36674 & -27.23141 \\ -27.23141 & 27.36674 \end{bmatrix}$

4- $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \qquad \exp(A) \approx \begin{bmatrix} 11.40191 & -8.68363 \\ -8.68363 & 11.40191 \end{bmatrix}$

5- $A = \begin{bmatrix} 0 & -8 \\ -8 & 0 \end{bmatrix}$ $\exp(A) \approx \begin{bmatrix} 1490.47916 & -1490.47883 \\ -1490.47883 & 1490.47916 \end{bmatrix}$

Circulantes 3x3

$$w = -\frac{1}{2} + i\,\frac{\sqrt{3}}{2}$$

Se A é uma matriz circulante 3x3 então A = F*P(D)F onde

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & w^2 \end{bmatrix} \qquad F^* = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & w & w^2 \\ 1 & w^2 & w \end{bmatrix}$$

e P(D) é um polinômio que depende de A (ver seção anterior). Segue que (conforme seção I.4) exp(A) = F*exp(P(D))F.

6- $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$

$$P(D) = I + 2D + 3D^2 = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & z & 0 \\ 0 & 0 & \overline{z} \end{bmatrix} \quad \text{com } z = -\frac{3}{2} - i\,\frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\exp(A) \approx \begin{bmatrix} 134.5726 & 134.3299 & 134.5262 \\ 134.5262 & 134.5726 & 134.3299 \\ 134.3299 & 134.5262 & 134.5726 \end{bmatrix}$$

7-

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 5 & 1 & 3 \\ 3 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$P(D) = I + 3D + 5D^2 = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 \\ 0 & z & 0 \\ 0 & 0 & \overline{z} \end{bmatrix} \quad \text{com } z = -3 - i\sqrt{3}$$

$$\exp(A) \approx \begin{bmatrix} 2701.0226 & 2701.0022 & 2701.059 \\ 2701.059 & 2701.0226 & 2701.0022 \\ 2701.0022 & 2701.059 & 2701.0226 \end{bmatrix}$$

<u>Circulantes 4x4</u>

$w = i$

Se A é uma matriz circulante 4x4 então $A = F^*P(D)F$ onde

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{bmatrix} \qquad F^* = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{bmatrix}$$

e P(D) é um polinômio matricial que depende de A (ver seção anterior). Segue que (conforme seção I.4) $\exp(A) = F^*\exp(P(D))F$.

8-

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

$$P(D) = I + 2D + 3D^2 + 4D^3 = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \overline{z} \end{bmatrix} \text{ com } z=-2-2i$$

$$\exp(A) \simeq \begin{bmatrix} 5506.6221 & 5506.5211 & 5506.6784 & 5506.6441 \\ 5506.6441 & 5506.6221 & 5506.5211 & 5506.6784 \\ 5506.6784 & 5506.6441 & 5506.6221 & 5506.5211 \\ 5506.5211 & 5506.6784 & 5506.6441 & 5506.6221 \end{bmatrix}$$

9-

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

$$P(D) = I + D + D^2 + D^3 = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\exp(A) \simeq \begin{bmatrix} 14.3995 & 13.3995 & 13.3995 & 13.3995 \\ 13.3995 & 14.3995 & 13.3995 & 13.3995 \\ 13.3995 & 13.3995 & 14.3995 & 13.3995 \\ 13.3995 & 13.3995 & 13.3995 & 14.3995 \end{bmatrix}$$

10-

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

$$P(D) = -I + 2D - 3D^2 + D^3 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{z} \end{bmatrix} \quad \text{com } z=2+i$$

$$\exp(A) \simeq \begin{bmatrix} 2.088359 & 3.20058 & -1.903963 & -3.017096 \\ -3.017096 & 2.088359 & 3.20058 & -1.903963 \\ -1.903963 & -3.017096 & 2.088359 & 3.20058 \\ 3.20058 & -1.903963 & -3.0170096 & 2.088359 \end{bmatrix}$$

<u>Circulantes 6x6</u>

$$w = \frac{1}{2} + i\,\frac{\sqrt{3}}{2}$$

Se A é uma matriz circulante 6x6 então $A = F^*P(D)F$ onde F e P são determinadas como na seção V.3. Segue que $\exp(A)=F^*\exp(P(D))F$.

11-

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

$$P(D) = I-2D^2-3D^3+3D^4+D^5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \overline{k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \overline{z} \end{bmatrix}$$

onde $z = 4 - 3\,i\,\sqrt{3}$ e $k = -3 + 2\,i\,\sqrt{3}$

$$e^{A} \simeq \begin{bmatrix} 17.715406 & 9.255238 & 18.998944 & -17.413553 & -8.915276 & -18.64076 \\ -18.64076 & 17.715406 & 9.255238 & 18.998944 & -17.413553 & -8.915276 \\ -8.915276 & -18.64076 & 17.715406 & 9.255238 & 18.998944 & -17.413553 \\ -17.413553 & -8.915276 & -18.64076 & 17.715406 & 9.255238 & 18.998944 \\ 18.998944 & -17.413553 & -8.915276 & -18.64076 & 17.715406 & 9.255238 \\ 9.255238 & 18.998944 & -17.413553 & -8.915276 & -18.64076 & 17.715406 \end{bmatrix}$$

V.5 - Conclusão

Comparando os resultados obtidos utilizando o programa para as matrizes acima com aqueles calculados, verificamos que o programa está correto .

Uma maneira de testar a eficiência deste programa seria através da comparação com programas elaborados a partir de outros métodos.

O desconhecimento de matrizes com exponencial matricial conhecida dificulta a análise dos méritos computacionais do programa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1- BAKER, G.A., Essentials of Padé approximants. New York, Academic Press, 1975.

2- CARPENA, L.H., Representação de funções matriciais e o algoritmo de Runckel-Pittelkow. Dissertação de mestrado, Porto Alegre, UFRGS,1985.

3- DAVIS,P., Circulant matrices. New York, John Wiley, 1975.

4- FAIR, W. & LUKE, Y.L., Padé approximations to the operator exponential. Numerische Mathematik, Berlin, 14:379-382 , 1970.

5- GOLUB, G.H. & WILKINSON, J.H., Ill-conditioned eigensystems and the computation of the Jordan canonical form. SIAM Review, Philadelphia, 18:578-619, 1976.

6- GOLUB, G.H. & VAN LOAN, C.F., Matrix computations. 2. ed. Baltimore, John Hopkins University Press, 1984.

7- GRAVES-MORRIS, P.R., The numerical calculation of Padé approximants. Lecture notes in mathematics, Berlin, 765: 231-245, 1979.

8- HALE, J., Ordinary differential equations. New York, John Wiley, 1969.

9- HUMMEL, P.M. & SEEBECK, C.L., American Mathematical Montly, Washington, 56:243-247, 1949.

10- KǍGSTRÖM, B. & RUHE, A., An algoritm for numerical computation of the Jordan normal form of a complex matrix.Report UMINF 51.74, Department of Information Processing, University of Umeå, Umeà, Sweden, 1974.

11- KǍGSTRÖM, B., Numerical computation of a matrix functions. Report UMINF 58.77, Department of Information Processing, University of Umeå, Umeǎ, Sweden, 1977.

12- MOLER, C.B. & VAN LOAN, C., Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. SIAM Review, Philadelphia, 20:801-836, 1978.

13- MOURA, C., Álgebra linear computacional. UnB, Brasília,1984.

14- ORZAG, S., Advanced mathematical methods for scientists and engineers. Mc. Graw Hill, 1979.

15- PARLETT, B.N., Computation of functions of triangular matrices. Memorandum nº ERL-M481, Eletronics Research Laboratory, University of California, Berkeley, 1974.

16- ———. A recurrence among the elements of functions of triangular matrices. Linear Algebra and its applications, New York, 14:117-121, 1976.

17- RICE, J.R., A theory of condition. SIAM Journal on numerical analysis, Philadelphia, 3(2):287-310,1966.

18- RINEHART, R.F., The equivalence of definitions of a matrix function. American Mathematical Montly, Washington, 62: 395-414, 1955.

19- ROCHE, J.R.,Sur le calcul de l'exponentielle d'une matrice. Lecture notes in mathematics, Berlin, 765:246-256, 1979.

20- RUIZ-CLAEYSSEN, J.C.; DÁVILA, M.; TSUKAZAN, T., Factor block circulants and periodic solutions of even order undanped matrix equations. Matemática Aplicada e Computacional, Rio de Janeiro, 2(1):81-96, 1983.

21- RUIZ-CLAEYSSEN, J.C., Dynamical solutions of linear matrix differential equations(to appear).

22- ———. Power series solutions for the mth-order matrix differential equation. Quart App. Math., vol. XXXVII, nº 4, 1980.

23- ———. Equações diferenciais matriciais. Monografia, UFRGS, Porto Alegre, 1980.

24- ______. A variation of constants formula with the dynamical solution of matrix differential equations. 1985 (submetido à Matemática Aplicada e Computacional).

25- RUNCKEL, H.J. & PITTELKOW, U., Pratical computation of matrix functions. Linear Algebra and its applications, New York, 49:161-179, 1983.

26- SMITH, B.T. et alii., Matrix eigensystem routines: EISPACK Guide. 2. ed. Lecture notes in computer science 6, New York, 1976.

27- TIKONOV, M. & SAMARSKII, I., Differential equations of mathematical physics. Moscou, MIR, 1968.

28- VAN LOAN, C.F., The sensitivity of the matrix exponential. SIAM Journal on numerical analysis, Philadelphia, 14: 971-981, 1977.

29- ______. On the limitation and application of Padé approximation to the matrix exponential In: Padé and Rational Approximation. edited by E.B.Saff and R.S.Varga, New York, Academic Press, p. 439-448, 1977.

30- VARGA, R.S., On higher order stable implicit methods for solving parabolic partial differential equations. Journal of Mathematics and Physics, 20:220-231, 1961.

31- WILKINSON, J.H., The algebraic eigenvalue problem. Oxford, Oxford University Press, 1965.

32- WRAGG, A. & DAVIES, C., Computation of the exponential of a matrix I: theoretical considerations. Journal of the Institute of Mathematics and its Applications, London, 11:369-375, 1973.

33- ______. Evaluation of the matrix exponential. Eletron. Lett, 9:525-526, 1973.

34- ______. Computation of the exponential of a matrix II: pratical considerations. Journal of the Institute of Mathematics and its Applications, London, 15:273-278, 1975.

35- YOUNG, D. & GREGORY, R., A survey of numerical mathematics. Addison-Wesley, 1973.

```
0    REM PROGRAMA PARA CALCULAR A EXPONENCIAL MATRICIAL
10   REM USANDO O ALGORITMO DE RUNCKEL-PITTELKOW
20   INPUT "ordem da matriz";N
40   INPUT "numero de termos";K2
50   IF X$="S" OR X$="s" THEN GOTO 330
60   DIM A(N+1,N+1),B#(N+1,N+1),C#(N+1,N+1),Q#(100),S1#(N)
61   DIM S#(N+1,N+1),H#(N+1,N+1,N+1),D#(100),K#(N+1)
70   FOR I=1 TO N
80   PRINT"entra linha";I:INPUT A$:K1=1:N1=LEN(A$)
90   FOR J=1 TO N
100  IF MID$(A$,K1,1)= " " AND K1<=N1 THEN K1=K1+1:GOTO 100
110  IF K1>N1 THEN X$="0" :GOTO 160
120  K=K1 : TAM=1
130  X$=MID$(A$,K1,1)
140  IF X$<>" " AND K1<=N1 THEN K1=K1+1:TAM=TAM+1 :GOTO 130
150  X$=MID$(A$,K,TAM)
160  A(I,J)=VAL(X$)
170  NEXT J
180  NEXT I
190  PRINT
200  REM lista matriz A
240  PRINT "MATRIZ A"
250  PRINT
260  REM mover A para C
270  GOSUB 2690
280  REM listar C
290  GOSUB 2800 : PRINT
300  INPUT "matriz vai para a impressora (S/N)";Y$ : PRINT
310  IF Y$="S" OR Y$="s" THEN LPRINT : LPRINT "MATRIZ A":LPRINT: GOSUB 2500
320  REM obter a exponencial
330  GOSUB 5021
340  PRINT
350  PRINT
360  PRINT "EXP (A) USANDO O ALGORITMO DE"
370  PRINT "RUNCKEL-PITTELKOW COM";K2;"TERMOS"
380  PRINT
390  GOSUB 2800:PRINT
400  INPUT "resultado vai para a impressora (S/N)";Z$
410  IF Z$="S" OR Z$="s" THEN LPRINT : LPRINT "EXP (A) USANDO O ALGORITMO 
INT "RUNCKEL-PITTELKOW COM",K2; "TERMOS":LPRINT:GOSUB 2500
420  PRINT
430  PRINT "queres calcular a exponencial da matriz A"
440  INPUT " para outro numero de termos (S/N)";X$
441  PRINT
442  PRINT
450  IF X$="S" OR X$="s" THEN GOTO 40
460  END
461  REM
462  REM
463  REM
2500 LPRINT
2510 FOR I=1 TO N
2520 FOR J=1 TO N
2530 LPRINT TAB(14*J-13)INT(C#(I,J)*1E+06)/1E+06;
2540 NEXT J
2550 NEXT I
2551 LPRINT
2552 RETURN
2553 REM
2554 REM
2555 REM
2560 REM guardar matriz A em C
2690 FOR I=1 TO N
2700 FOR J=1 TO N
2710 C#(I,J)=A(I,J)
2720 NEXT J
2730 NEXT I
2740 RETURN
2791 REM
2792 REM
2793 REM
```

```
2800 PRINT
2810 FOR I=1 TO N
2820 FOR J=1 TO N
2830 PRINT TAB(14*J-13)INT(C#(I,J)*1E+06)/1E+06;
2840 NEXT J
2850 NEXT I
2860 PRINT
2870 RETURN
2871 REM
2872 REM
2873 REM
4500 REM CALCULO DE hr(A)=H(r) E DOS COEFICIENTES DO POLINOMIO
4501 REM CARACTERISTICO DA MATRIZ A UTILIZANDO O ALGORITMO DE
4502 REM FADDEV-FRAME
4510 K#(0)=1
4520 REM matriz identidade em H(0)
4530 B=1
4540 FOR I=1 TO N
4550 FOR J=1 TO N
4560 IF I=J THEN H#(I,J,0)=B
4570 NEXT J
4580 NEXT I
4600 FOR M=1 TO N
4610 REM B=AxH(m-1)
4620 FOR I=1 TO N
4630 FOR J=1 TO N
4640 B#(I,J)=0
4650 FOR K=1 TO N
4660 B#(I,J)=B#(I,J)+A(I,K)*H#(K,J,M-1)
4670 NEXT K
4680 NEXT J
4690 NEXT I
4700 REM calcular traco de B
4710 T#=0
4720 FOR I=1 TO N
4730 T#=T#+B#(I,I)
4740 NEXT I
4750 K#(M)=-T#/M
4770 REM H(m)=AxH(m-1)+K(m)xI
4780 FOR I=1 TO N
4790 FOR J=1 TO N
4800 IF J=I THEN H#(I,J,M)=B#(I,J)+K#(M) ELSE H#(I,J,M)=B#(I,J)
4810 NEXT J
4820 NEXT I
4830 NEXT M
4850 RETURN
4851 REM
4852 REM
4853 REM
4991 REM
4992 REM
4993 REM
5000 REM EXPONENCIAL MATRICIAL VIA RUNCKEL-PITTELKOW
5010 REM dados para a subrotina:matriz A,n,k2
5021 FOR I=1 TO N
5022 FOR J=1 TO N
5023 S#(I,J)=0 : C#(I,J)=0
5024 NEXT J
5025 NEXT I
5026 IF X$="S" OR X$="s" THEN GOTO 5032
5030 REM calcular hr(A)=H(r)
5031 GOSUB 4510
5032 REM calcular S1(0)
5033 GOSUB 5510
5034 REM calcular S=H(0)S1(0)
5035 GOSUB 5700
5040 FOR R=1 TO N-1
5041 REM calcular S1(r)
5042 GOSUB 5800
5140 REM S=S+H(r)S1(r)
5150 FOR I=1 TO N
5160 FOR J=1 TO N
```

```
5170 S#(I,J)=S#(I,J)+S1#(R)*H#(I,J,R)
5180 NEXT J
5190 NEXT I
5200 NEXT R
5210 REM mover resultado em S para C
5220 FOR I=1 TO N
5230 FOR J=1 TO N
5240 C#(I,J)=S#(I,J)
5250 NEXT J
5260 NEXT I
5270 REM retornar ao programa original
5280 RETURN
5490 REM calculo de S1(O)
5510 D#(O)=1
5520 Q#(O)=D#(O)
5530 FOR I=1 TO K2
5540 D#(I)=0
5545 IF I>N THEN MIN=N ELSE MIN=I
5550 FOR L=1 TO MIN
5560 D#(I)=D#(I)-K#(L)*Q#(I-L)
5570 NEXT L
5580 Q#(I)=D#(I)
5590 FOR J=0 TO I
5600 Q#(J)=Q#(J)/(I+1)
5610 NEXT J
5620 NEXT I
5630 S1#(O)=0
5640 FOR J=0 TO K2
5650 S1#(O)=S1#(O)+D#(J)
5660 NEXT J
5670 RETURN
5680 REM
5690 REM
5700 REM calcular S=H(O)S1(O)=IS1(O)
5710 FOR I=1 TO N
5720 FOR J=1 TO N
5730 IF I=J THEN S#(I,J)=S1#(O)
5740 NEXT J
5750 NEXT I
5760 RETURN
5800 REM calcular S1(r)
5810 FOR I=0 TO K2-R
5820 D#(I)=D#(I)/(I+R)
5830 NEXT I
5840 S1#(R)=0
5850 FOR J=0 TO K2-R
5860 S1#(R)=S1#(R)+D#(J)
5870 NEXT J
5880 RETURN
```