

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e
Computação Científica

Método QR: um fluxo de matrizes

Fábio Antonio Dorini
Orientador: Prof. Dr. Licio Hernanes Bezerra

Florianópolis
Março de 2000

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e
Computação Científica

Método QR: um fluxo de matrizes

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica, do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática, com Área de Concentração em Álgebra Linear Computacional.

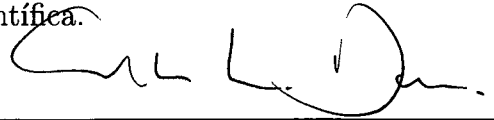
Fábio Antonio Dorini
Florianópolis
Março de 2000

Método QR: um fluxo de matrizes

por

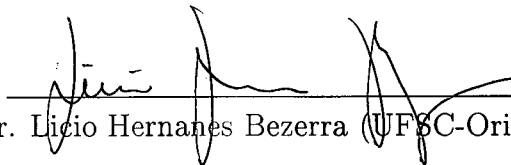
Fábio Antonio Dorini

Esta Dissertação foi julgada para a obtenção do Título de “Mestre”,
Área de Concentração em Álgebra Linear Computacional, e aprovada em sua forma
final pelo Curso de Pós-Graduação em Matemática e
Computação Científica.

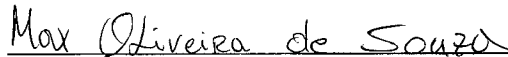


Celso Melchíades Dória
Coordenador

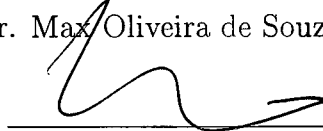
Comissão Examinadora



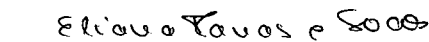
Prof. Dr. Lício Hernanes Bezerra (UFSC-Orientador)



Prof. Dr. Max Oliveira de Souza (PUC-RJ)



Prof. Dr. Ruy Exel Filho (UFSC)



Prof. Dra. Eliana Farias e Soares (UFSC)

Florianópolis, 29 de março de 2000.

A Deus
e a todas as
suas manifestações

Agradecimentos

A Deus;

Aos meus pais Danilo e Marilene Carelli Dorini;

Ao meu irmão Wagner Alexandre Dorini;

À minha segunda família: Marcio, Nelsi e Luiza da Silva;

Ao meu orientador Licio Hernanes Bezerra;

Aos professores Ruy Charão e Mirian Buss Gonçalves;

Aos colegas de pós graduação: Dirceu Bagio, Claiton Massarrolo, Rafael Casali, Oswaldo Campos, Danilo Royer, Milton Kist, Airton Kist, Andresa Pescador, Jorge Paulino, Maria Inez Cardoso, Daniel Gonçalves, Graziela Sombrio, Patricia da Cunha, Ana Paula Correa e Janice Reichert;

Às secretárias Elisa do Amaral, Iara e Silvia;

À minha namorada Leyza Baldo;

À Universidade Federal de Santa Catarina;

À Universidade do Oeste de Santa Catarina - Campus de Videira;

À CAPES;

A todos os meus amigos.

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
Introdução	1
1 Preliminares	3
1.1 Algumas Decomposições Importantes	3
1.2 Equações Diferenciais Ordinárias	7
1.3 Funções de Matrizes Simétricas	8
2 Fluxo de Matrizes	11
2.1 Fluxo de Toda	12
2.2 Generalização do Fluxo de Toda	31
3 Método QR versus Fluxos Isospectrais	44
3.1 Método QR	44
3.2 Método QR e o Fluxo $G(\lambda) = \ln(\lambda)$	49
4 Considerações Numéricas sobre o Fluxo de Toda	52
Conclusões	61
Anexos	62
Apêndice 1	67
Referências Bibliográficas	68

Resumo

Neste trabalho demonstramos a convergência do método QR no caso de matrizes de Jacobi via fluxo de Toda generalizado, baseado em [4], [14] e [3]. Os fluxos de Toda generalizados são caracterizados pela equação diferencial:

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t))), \quad L(0) = L_0,$$

em que $L(t)$ é uma matriz real, tridiagonal e simétrica, $G(\lambda)$ é uma função real, analítica e injetiva num domínio que contém o espectro de L_0 ; e $B(G(L(t))) = [G(L(t))_+] - [G(L(t))_-]$ é uma matriz anti-simétrica, sendo $G(L(t))_+$ e $G(L(t))_-$ as partes estritamente superior e inferior, respectivamente, de $G(L(t))$.

Inicialmente, estudamos o caso $G(\lambda) = \lambda$, o qual caracteriza o fluxo de Toda. Mostramos que este fluxo é isospectral e converge, quando $t \rightarrow \infty$, a uma matriz diagonal. Esses resultados são generalizados e, então, demonstramos que o método QR é uma avaliação, em tempos inteiros, do fluxo de Toda generalizado caracterizado por $G(\lambda) = \ln(\lambda)$. Para finalizar, demonstramos um teorema sobre a velocidade de convergência do fluxo de Toda e apresentamos algumas comparações entre resultados obtidos pelo método QR e por uma resolução numérica da equação de Toda.

Abstract

In this work we prove the convergence of the QR method for Jacobi matrices by using a generalized Toda flow, based on [4], [14] e [3]. Generalized Toda flows are described by the differential equation:

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t))), \quad L(0) = L_0,$$

where $L(t)$ is a symmetric tridiagonal real matrix, $G(\lambda)$ is a analytic real function, which is one to one in an open domain which includes the spectrum of L_0 ; and $B(G(L(t))) = [G(L(t))_+] - [G(L(t))_-]$ is a skew symmetric matrix, where $G(L(t))_+$ and $G(L(t))_-$ denote the strictly upper and lower triangular parts, respectively, of $G(L(t))$.

First, we study the case $G(\lambda) = \lambda$, which describes the Toda flow. We prove that this flow is isospectral and converges, as $t \rightarrow \infty$, to a diagonal matrix. After, these results are generalized and we prove that the QR method is an evaluation for integer times of the generalized Toda flow described by $G(\lambda) = \ln(\lambda)$. Finally, we prove a theorem about the convergence rate of the Toda flow and present a comparison between results obtained by the QR method and the ones obtained by a numerical resolution of the Toda flow.

Introdução

Em 1961, Francis desenvolveu o método QR [9] para calcular autovalores de uma dada matriz. Esse método depende, essencialmente, da fatoração QR (Q ortogonal e R triangular superior) da matriz. Se $A_0 = A$, $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, e $Q_k R_k$ é a fatoração QR de A_k , então A_{k+1} é definido por:

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

Em geral, a sequência $\{A_k\}$ converge para a forma triangular superior de A, ou seja,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = T = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & \cdots & * \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

em que $A = QTQ^H$ é uma decomposição de Schur de A. Note que $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ constituem o espectro de A. A demonstração desse fato pode ser encontrada, por exemplo, em [9], (cap. 5). Evidentemente, se A_0 é simétrica então a matriz limite da sequência $\{A_k\}$ é diagonal.

Atualmente, o método QR é considerado o mais efetivo entre os métodos conhecidos para a solução do problema de autovalores.

No início da década de 80, alguns pesquisadores ([4], [14] e [3]) perceberam uma conexão entre as iterações do método QR e a avaliação, em tempos inteiros, de um fluxo de Toda generalizado. Os fluxos de Toda generalizados são caracterizados pela equação diferencial:

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t))), \quad L(0) = L_0, \quad (1)$$

em que

$$L(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) & b_1(t) & & & & \\ b_1(t) & a_2(t) & b_2(t) & & & \\ & b_2(t) & a_3(t) & b_3(t) & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1}(t) & b_{n-1}(t) \\ & & & & b_{n-1}(t) & a_n(t) \end{pmatrix}$$

é uma matriz real, tridiagonal e simétrica, $G(\lambda)$ é uma função real, analítica e injetiva em um domínio aberto que contém o espectro de L_0 . $B(G(L(t))) = [G(L(t))_+] - [G(L(t))_-]$ é uma matriz anti-simétrica, sendo $G(L(t))_+$ e $G(L(t))_-$ as partes estritamente superior e inferior, respectivamente, de $G(L(t))$. A escolha da função $G(\lambda)$ caracteriza a dinâmica do fluxo $L(t)$.

Estes fluxos possuem propriedades muito importantes como, por exemplo: os autovalores do fluxo $L(t)$ independem de t , ou seja, o fluxo é isospectral; o fluxo $L(t)$ converge para uma matriz diagonal quando t tende ao infinito. Se em (1) fizermos $G(\lambda) = \lambda$, obtemos a equação de Toda. Esta equação foi introduzida por Flaschka [8] no estudo de mecânica estatística do *Toda Lattice*.

Neste trabalho demonstramos a convergência do método QR para o problema de autovalores de uma matriz de Jacobi, baseado em [4], [14], [3]. Para isso, utilizamos o fluxo de Toda generalizado, obtido fazendo-se $G(\lambda) = \ln(\lambda)$ em (1).

No capítulo 1 apresentamos alguns conceitos e resultados fundamentais para o trabalho. O §1 do capítulo 2 é voltado para o estudo do fluxo de Toda. Os resultados obtidos para este fluxo são estendidos para o fluxo de Toda generalizado na seção subsequente. Em resumo, mostramos que a solução, $L(t)$, do sistema (1) é isospectral, ou seja, o espectro de $L(t)$ é preservado para qualquer t . Ademais, $L(t)$ é definido em toda a reta real e converge a uma matriz diagonal, consistindo de autovalores de L_0 , quando $t \rightarrow \pm\infty$. No capítulo 3 introduzimos o método QR, suas propriedades para o caso em que L_0 é uma matriz de Jacobi com superdiagonal positiva e, evidentemente, sua relação com o fluxo $G(\lambda) = \ln(\lambda)$. Enfim, mostramos que o método QR é uma avaliação, em tempos inteiros, do fluxo anteriormente referido. Para finalizar, no capítulo 4, analisamos a velocidade de convergência do fluxo de Toda e apresentamos resultados numéricos para comparar o método QR com a resolução numérica da equação de Toda.

Capítulo 1

Preliminares

1.1 Algumas Decomposições Importantes

Nesta seção apresentamos alguns resultados da teoria de matrizes que serão fundamentais nos capítulos seguintes.

Teorema 1.1 (Triangularização Unitária de Schur). *Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ com autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ em alguma ordem prescrita. Então existe uma matriz unitária $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tal que*

$$U^H A U = T = [t_{ij}],$$

em que T é triangular superior, com entradas diagonais $t_{ii} = \lambda_i$ ($\forall i = 1 : n$).

Isto é, toda matriz quadrada A é unitariamente equivalente a uma matriz triangular cujas entradas diagonais são os autovalores de A em alguma ordem prescrita.

Demonstração:

A prova do teorema é algorítmica.

Seja $x^{(1)} \in \mathbb{C}^n$ um autovetor normalizado de A associado ao autovalor λ_1 .

Seja $\{x^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(n)}\}$ uma base de \mathbb{C}^n .

Aplicamos o procedimento de ortonormalização de Gram-Schmidt a esta base e produzimos uma base ortonormal $\{x^{(1)}, z^{(2)}, \dots, z^{(n)}\}$ de \mathbb{C}^n .

Façamos:

$$U_1 = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x^{(1)} & z^{(2)} & \dots & z^{(n)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Obviamente U_1 é unitária e $AU_1e_1 = \lambda_1x^{(1)}$.

Portanto, $U_1^H AU_1e_1 = \lambda_1U_1^Hx^{(1)} = \lambda_1e_1$.

Assim,

$$U_1^H AU_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix},$$

em que $A_1 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$.

Evidentemente $\lambda(A_1) = \{\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n\}$.

Agora, seja $x^{(2)} \in \mathbb{C}^{n-1}$ um autovetor normalizado de A_1 correspondente ao autovalor λ_2 .

Seja $\{x^{(2)}, w^{(3)}, \dots, w^{(n)}\}$ uma base de \mathbb{C}^{n-1} . Novamente aplicamos Gram-Schmidt e produzimos $U_2 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ unitária tal que:

$$U_2^H A_1 U_2 = \begin{pmatrix} \lambda_2 & * \\ 0 & A_2 \end{pmatrix},$$

em que $A_2 \in \mathbb{C}^{(n-2) \times (n-2)}$.

Considere

$$V_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix}.$$

As matrizes V_2 e U_1V_2 são unitárias. Além disso,

$$\begin{aligned} V_2^H U_1^H AU_1 V_2 &= V_2^H \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} V_2 = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & U_2^H A_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & U_2^H A_1 U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & * \\ 0 & \lambda_2 & * \\ 0 & 0 & A_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Continuando esta redução produzimos matrizes unitárias $U_i \in \mathbb{C}^{(n-i+1) \times (n-i+1)}$

($i = 1 : n - 1$) e matrizes unitárias $V_i \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ($i = 2 : n - 1$). Ademais, a matriz

$U = U_1V_2\dots V_{n-1}$ é unitária e $U^H AU$ produz a forma desejada.

□

Observação 1.2. Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e todos os autovalores de A são reais, então os autovetores podem ser escolhidos reais (se o autovetor for complexo, escolhemos a parte real ou imaginária do mesmo, que também é autovetor) de tal modo que U seja real e ortogonal.

Corolário 1.3 (Decomposição Espectral). Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é simétrica, então existe Q ortogonal tal que $Q^T A Q = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ é diagonal.

Demonstração:

Pelo teorema da triangularização de Schur e pela observação 1.2, existe $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal tal que $Q^T A Q = T$ é triangular superior.

Mas, $T^T = (Q^T A Q)^T = Q^T A^T Q = Q^T A Q = T$.

Portanto, T é diagonal.

□

Teorema 1.4 (Fatoração QR). Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ inversível. Então existem únicas matrizes $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ortogonal, e $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, triangular superior com entradas diagonais positivas, tal que $A = QR$.

Demonstração:

Escrevemos $A = QR$, ou seja,

$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

em que os elementos de Q e de R são as variáveis desconhecidas.

Da primeira coluna da identidade (1.1), obtemos:

$$a_1 = r_{11} q_1.$$

Como, por hipótese, A é não singular, temos que $a_i \neq 0$ ($i = 1 : n$).

Usando o fato que $\|q_1\|_2 = 1$, temos que $|r_{11}| = \|a_1\|_2$.

Assim,

$$r_{11} = \pm \|a_1\|_2 \quad \text{e} \quad q_1 = \pm \frac{a_1}{\|a_1\|_2}.$$

Da segunda coluna da identidade (1.1), vemos que:

$$a_2 = r_{12}q_1 + r_{22}q_2.$$

Da ortogonalidade de Q segue que $r_{12} = \langle a_2, q_1 \rangle$ e, portanto, $r_{22}q_2 = a_2 - (q_1^T a_2)q_1 \neq 0$ (pois A é não singular).

Como $\|q_2\|_2 = 1$, temos que $|r_{22}| = \|a_2 - (q_1^T a_2)q_1\|_2$.

Assim,

$$r_{22} = \pm \|a_2 - (q_1^T a_2)q_1\|_2 \quad \text{e} \quad q_2 = \pm \frac{a_2 - (q_1^T a_2)q_1}{\|a_2 - (q_1^T a_2)q_1\|_2}.$$

Da k -ésima coluna da identidade (1.1), obtemos:

$$a_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \dots + r_{kk}q_k.$$

Pela ortogonalidade de Q , segue que $r_{ik} = \langle a_k, q_i \rangle$ ($i = 1 : k - 1$).

Desta maneira, $r_{kk}q_k = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (q_i^T a_k)q_i \neq 0$, pois A é não singular.

Logo,

$$r_{kk} = \pm \|a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (q_i^T a_k)q_i\|_2 \quad \text{e} \quad q_k = \pm \frac{a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (q_i^T a_k)q_i}{\|a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (q_i^T a_k)q_i\|_2}.$$

Para obter unicidade de Q e de R basta escolher r_{ii} positivo.

□

Observação 1.5. A matriz Q , da fatoração QR de uma matriz dada $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, é obtida pela aplicação do processo de ortonormalização de Gram-Schmidt às colunas da matriz A . Em particular, a k -ésima coluna de Q é uma combinação linear das k primeiras colunas de A .

Definição 1.6. Uma matriz $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é dita **Hessemberg superior** se $a_{ij} = 0$ sempre que $i > j + 1$. Caso A^T seja Hessemberg superior, dizemos que A é **Hessemberg inferior**.

Definição 1.7. Uma matriz $T = [t_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é dita **tridiagonal** se $t_{ij} = 0$ sempre que $|i - j| > 1$, ou seja, se T é Hessemberg inferior e superior.

Teorema 1.8 (Forma Hessemberg de uma Matriz). *Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser decomposta em $A = QHQ^T$, em que $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é ortogonal e $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é Hessemberg superior.*

Demonstração:

Ver [7], pp. 344 – 345.

□

Corolário 1.9 (Forma Tridiagonal de uma matriz simétrica). *Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica é tridiagonalizável, ou seja, existem $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal e $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tridiagonal tal que $Q^T A Q = T$.*

Demonstração:

Como, por hipótese, a matriz A é simétrica, segue do teorema (1.8) que H é Hessemberg superior e inferior e, portanto, tridiagonal.

□

1.2 Equações Diferenciais Ordinárias

A seguir citamos alguns resultados relevantes da teoria das equações diferenciais ordinárias que serão úteis nos capítulos posteriores. As demonstrações são omitidas, porém podem ser encontradas em [10] ou [5].

Considere o problema de valor inicial de Cauchy,

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0, \quad (1.2)$$

em que $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma função definida no aberto $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$.

Uma solução do problema (1.2) é uma função $\phi : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, diferenciável no aberto I , tal que

[i] $(t, \phi(t)) \in \Omega \quad (\forall t \in I)$;

[ii] $\frac{d}{dt}(\phi(t)) = f(t, \phi(t)) \quad (\forall t \in I)$;

[iii] $\phi(t_0) = x_0$.

Teorema 1.10 (Teorema de Picard). *Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função contínua definida no aberto $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. Suponhamos que a derivada parcial com relação à segunda variável, $f_x : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$, seja contínua também. Então, para $(t_0, x_0) \in \Omega$, existem um intervalo I contendo t_0 e uma única função $\phi : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ com $(t, \phi(t)) \in \Omega$ ($\forall t \in I$), que é solução do problema de valor inicial*

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0.$$

Definição 1.11. *Considere o PVI (1.2). $I = (\omega_-, \omega_+)$ é dito um intervalo maximal se não existe um intervalo contendo propriamente I em que o PVI (1.2) tenha solução.*

Teorema 1.12. *Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função contínua definida no aberto $\Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. Suponhamos que a derivada parcial com relação à segunda variável, $f_x : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$, seja contínua também. Então, são válidas:*

- [i] *Toda solução do PVI (1.2) pode ser estendida a um intervalo maximal.*
- [ii] *Se $\phi(t)$ é a solução do PVI (1.2) com intervalo maximal $I = (\omega_-, \omega_+)$, então $(t, \phi(t)) \rightarrow \partial\Omega$ quando $t \rightarrow \omega_+$, isto é, dado $\kappa \subset \Omega$ compacto, existe $\tau < \omega_+$ tal que $(t, \phi(t)) \notin \kappa$ para $t \in (\tau, \omega_+)$.*
- [iii] *Se $\phi(t)$ é a solução do PVI (1.2) com intervalo maximal $I = (\omega_-, \omega_+)$ e se ϕ fica limitada em I , então ϕ é globalmente definida.*

1.3 Funções de Matrizes Simétricas

Definição 1.13. *Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e $A = Q\Lambda Q^T$ uma decomposição espectral de A , $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, conforme corolário 1.3. Seja f uma função real, analítica e definida no espectro de A . Definimos $f(A)$ como sendo a seguinte matriz:*

$$f(A) = Q \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T.$$

Teorema 1.14. *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica. Seja f uma função analítica e definida no espectro de A . São válidas as afirmações seguintes:*

- [i] *A comuta com $f(A)$, ou seja, $Af(A) = f(A)A$;*
- [ii] *$f(A)$ é simétrica.*

Demonstração:

[i]

$$\begin{aligned} f(A)A &= Q \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T Q \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) Q^T = \\ &= Q \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) Q^T = \\ &= Q \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) Q^T Q \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T = Af(A). \end{aligned}$$

Portanto, A comuta com $f(A)$.

[ii]

$$\begin{aligned} [f(A)]^T &= [Q \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T]^T = \\ &= Q [\operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n))]^T Q^T = f(A). \end{aligned}$$

Portanto, $f(A)$ é simétrica.

□

Teorema 1.15. *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica. Seja f uma função analítica cuja representação em série de potências é $f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k$, em um aberto contendo o espectro de A , $\lambda(A)$. Então*

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

Demonstração:

$$\begin{aligned} f(A) &= Q \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T = \\ &= Q \operatorname{diag} \left(\sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda_1^k, \dots, \sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda_n^k \right) Q^T = \\ &= Q \left(\sum_{k=0}^{\infty} c_k \Lambda^k \right) Q^T = \sum_{k=0}^{\infty} c_k Q \Lambda^k Q^T = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} c_k (Q \Lambda Q^T)^k = \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k. \end{aligned}$$

□

Exemplo 1.16. *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica. Então:*

$$[i] \quad \exp(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!};$$

[ii] *Se A é definida positiva (autovalores positivos) então $\ln(A)$ é definida. Neste caso,*

$$\ln(\exp(A)) = \exp(\ln(A)) = A.$$

Teorema 1.17. *Toda função analítica de uma matriz simétrica é um polinômio desta matriz, ou seja, se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é simétrica e f é uma função analítica e definida no espectro de A , então existe um polinômio $p(\lambda)$, de grau menor ou igual a $(n - 1)$, tal que $f(A) = p(A)$.*

Demonstração:

De acordo com a definição 1.13,

$$f(A) = Q \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T.$$

Considere o conjunto dos pontos do \mathbb{R}^2 ,

$$\{(\lambda_1, f(\lambda_1)), \dots, (\lambda_n, f(\lambda_n))\}.$$

Existe um polinômio, $p(\lambda)$, de grau menor ou igual a $(n - 1)$, interpolador destes n pontos, ou seja, existe $p(\lambda)$ tal que

$$p(\lambda_i) = f(\lambda_i) \quad (\forall i = 1 : n).$$

Portanto,

$$\begin{aligned} f(A) &= Q \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) Q^T = \\ &= Q \text{diag}(p(\lambda_1), \dots, p(\lambda_n)) Q^T = p(A). \end{aligned}$$

□

função real, analítica e injetiva em um domínio aberto que contém o espectro de L_0 . $B(G(L(t))) = [G(L(t))_+] - [G(L(t))_-]$ é uma matriz anti-simétrica, sendo $G(L(t))_+$ e $G(L(t))_-$ as partes estritamente superior e inferior, respectivamente, de $G(L(t))$. Observe que a equação de Toda é obtida fazendo-se $G(\lambda) = \lambda$ na equação de Toda generalizada.

Na seção 2.1 apresentamos a origem da equação de Toda e algumas propriedades do fluxo de Toda, baseados em [3]. Em seguida, analisamos este fluxo para o caso em que L_0 é uma matriz de Jacobi. Na seção 2.2 expomos o fluxo de Toda generalizado e estendemos os resultados sobre o fluxo de Toda para este fluxo, baseados nos artigos [4] e [14]. Este capítulo, juntamente com o capítulo seguinte, fornece uma demonstração da convergência do método QR (método para calcular autovalores de uma matriz dada) no caso de matrizes de Jacobi.

2.1 Fluxo de Toda

Iniciamos esta seção apresentando um modelo físico do qual se origina o sistema que nos interessa para o restante do trabalho. Esse modelo, de propagação de ondas em um cristal, é dito *Toda Lattice* [11]. Ele é dado pelo sistema:

$$\begin{cases} \dot{x}_k(t) = y_k(t) & (k = 1 : n) \\ \dot{y}_1(t) = -\exp(x_1(t) - x_2(t)) \\ \dot{y}_k(t) = \exp(x_{k-1}(t) - x_k(t)) - \exp(x_k(t) - x_{k+1}(t)) & (k = 2 : n - 1) \\ \dot{y}_n(t) = \exp(x_{n-1}(t) - x_n(t)) \end{cases} \quad (2.1)$$

Este sistema descreve o movimento de n partículas dispostas no eixo real, em que $x_k(t)$ e $y_k(t)$ são a posição e velocidade, respectivamente, da k -ésima partícula no instante de tempo t .

Façamos a seguinte troca de “variáveis”:

$$a_k(t) = -\frac{y_k(t)}{2} \quad (k = 1 : n) \quad \text{e} \quad (2.2)$$

$$b_k(t) = \frac{1}{2} \exp \frac{x_k(t) - x_{k+1}(t)}{2} \quad (k = 1 : n - 1). \quad (2.3)$$

Assim,

$$\dot{a}_1(t) = -\frac{1}{2} \dot{y}_1(t) = \frac{1}{2} \exp(x_1(t) - x_2(t)) =$$

$$= \frac{1}{2} \left[\exp \left(\frac{x_1(t) - x_2(t)}{2} \right) \right]^2 = 2 \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{x_1(t) - x_2(t)}{2} \right) \right]^2 = 2b_1^2(t),$$

$$\begin{aligned} \dot{a}_k(t) &= -\frac{1}{2} \dot{y}_k(t) = -\frac{1}{2} [\exp(x_{k-1}(t) - x_k(t)) - \exp(x_k(t) - x_{k+1}(t))] = \\ &= -2 \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{x_{k-1}(t) - x_k(t)}{2} \right) \right]^2 + 2 \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{x_k(t) - x_{k+1}(t)}{2} \right) \right]^2 = \\ &= 2b_k^2(t) - 2b_{k-1}^2(t) \quad (k = 2 : n-1), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{a}_n(t) &= -\frac{1}{2} \dot{y}_n(t) = -\frac{1}{2} \exp(x_{n-1}(t) - x_n(t)) = \\ &= -\frac{1}{2} \left[\exp \left(\frac{x_{n-1}(t) - x_n(t)}{2} \right) \right]^2 = -2 \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{x_{n-1}(t) - x_n(t)}{2} \right) \right]^2 = -2b_n^2(t) \quad e \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{b}_k(t) &= \frac{1}{2} \exp \left(\frac{x_k(t) - x_{k+1}(t)}{2} \right) \left(\frac{\dot{x}_k(t) - \dot{x}_{k+1}(t)}{2} \right) = \\ &= b_k(t) \left(\frac{y_k(t)}{2} - \frac{y_{k+1}(t)}{2} \right) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)) \quad (k = 1 : n-1). \end{aligned}$$

Nas novas variáveis o sistema (2.1) pode ser descrito da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \dot{a}_k(t) = 2b_k^2(t) - 2b_{k-1}^2(t) & (k = 1 : n), \\ \dot{b}_k(t) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)) & (k = 1 : n-1), \end{cases} \quad (2.4)$$

em que $b_0(t) \equiv 0$ e $b_n(t) \equiv 0$ ($\forall t$).

A razão para a *troca de variáveis* pode ser vista na proposição que segue:

Proposição 2.1. *Considere o PVI constituído pelo sistema (2.4) com condições iniciais $a_k(0)$ ($k = 1 : n$) e $b_k(0)$ ($k = 1 : n-1$). Este sistema é equivalente à equação:*

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(t)L(t) - L(t)B(t), \quad L(0) = L_0, \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned}
(B(t)L(t) - L(t)B(t))_{k,k+1} &= e_k^T B(t)L(t)e_{k+1} - e_k^T L(t)B(t)e_{k+1} = \\
(0, \dots, 0, -b_{k-1}(t), \underbrace{0}_k, b_k(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{b_k(t)}_k, a_{k+1}(t), b_{k+1}(t), 0, \dots, 0)^T - \\
-(0, \dots, 0, b_{k-1}(t), \underbrace{a_k(t)}_k, b_k(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{b_k(t)}_k, 0, -b_{k+1}(t), 0, \dots, 0)^T = \\
&= b_k(t)a_{k+1}(t) - b_k(t)a_k(t) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)) = \dot{b}_k(t) \quad (k = 1 : n - 1).
\end{aligned}$$

Sejam $i, j \in \mathbb{N}$ tal que $i - j > 1$.

$$\begin{aligned}
(B(t)L(t) - L(t)B(t))_{i,j} &= e_i^T B(t)L(t)e_j - e_i^T L(t)B(t)e_j = \\
(0, \dots, 0, \underbrace{-b_{i-1}(t)}_{i-1}, \underbrace{0}_i, b_i(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, b_{j-1}(t), \underbrace{a_j(t)}_j, \underbrace{b_j(t)}_{j+1}, 0, \dots, 0)^T - \\
(0, \dots, 0, \underbrace{b_{i-1}(t)}_{i-1}, \underbrace{a_i(t)}_i, b_i(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, b_{j-1}(t), \underbrace{0}_j, \underbrace{-b_j(t)}_{j+1}, 0, \dots, 0)^T.
\end{aligned}$$

Como $i - j > 1$, segue que $i \geq j + 2$. Assim, se $i > j + 2$, fica claro, nos cálculos acima, que $(B(t)L(t) - L(t)B(t))_{i,j} = 0$. Porém, se $i = j + 2$, temos

$$\begin{aligned}
&(B(t)L(t) - L(t)B(t))_{j+2,j} = \\
&= (0, \dots, 0, \underbrace{-b_{j+1}(t)}_{j+1}, \underbrace{0}_{j+2}, b_{j+2}(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, b_{j-1}(t), \underbrace{a_j(t)}_j, \underbrace{b_j(t)}_{j+1}, 0, \dots, 0)^T - \\
&-(0, \dots, 0, \underbrace{b_{j+1}(t)}_{j+1}, \underbrace{a_{j+2}(t)}_{j+2}, b_{j+2}(t), 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, b_{j-1}(t), \underbrace{0}_j, \underbrace{-b_j(t)}_{j+1}, 0, \dots, 0)^T = \\
&= (-b_{j+1}(t)b_j(t)) - (-b_j(t)b_{j+1}(t)) = 0.
\end{aligned}$$

Portanto, $B(t)L(t) - L(t)B(t)$ é tridiagonal. □

Honestamente, o que fizemos não foi uma troca de variáveis (isto é, um difeomorfismo ou, pelo menos, uma bijeção) pois começamos com $2n$ variáveis e sobraram $(2n - 1)$ variáveis. É evidente que se solucionarmos o sistema (2.1) obtemos a solução do sistema (2.4). A seguir verificamos que a recíproca da proposição acima

também é verdadeira, ou seja, uma vez solucionado o sistema (2.4), podemos obter a solução do sistema (2.1).

Suponhamos, então, que o sistema (2.4) está solucionado, ou seja, conhecemos $a_k(t)$ ($k = 1 : n$) e $b_k(t)$ ($k = 1 : n - 1$). Por (2.2), temos que $a_k(t) = -\frac{y_k(t)}{2}$ ($k = 1 : n$). Portanto $y_k(t) = -2a_k(t)$ ($k = 1 : n$). O próximo passo é determinar $x_k(t)$ ($k = 1 : n$). Para tanto, sabemos da lei de conservação de momento que o centro de massa do sistema,

$$c_m(t) = \frac{x_1(t) + x_2(t) + \dots + x_n(t)}{n},$$

move-se com velocidade constante. Pois $\sum_{k=1}^n \ddot{x}_k(t) = 0$, de acordo com o sistema (2.1) (uma simples conta).

Com base no que expomos acima, temos que

$$\frac{d}{dt}(c_m(t)) = c, \quad (2.8)$$

em que c é uma constante.

Sabemos, por (2.3), que $b_k(t) = \frac{1}{2} \exp \frac{x_k(t) - x_{k+1}(t)}{2}$ ($k = 1 : n - 1$), ou seja, $2b_k(t) = \exp \frac{x_k(t) - x_{k+1}(t)}{2}$ ($k = 1 : n - 1$).

Portanto,

$$x_k(t) - x_{k+1}(t) = 2 \ln(2b_k(t)) \quad (k = 1 : n - 1). \quad (2.9)$$

Por (2.8) temos que

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k(t) \right) = c.$$

Assim,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k(t) = ct + c_0.$$

Como $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k(0) = c_0$, segue que

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k(t) = ct + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k(0). \quad (2.10)$$

De (2.9) e (2.10) obtemos o sistema:

$$\begin{cases} x_1(t) - x_2(t) = 2 \ln(2b_1(t)) \\ x_2(t) - x_3(t) = 2 \ln(2b_2(t)) \\ \vdots \\ x_{n-1}(t) - x_n(t) = 2 \ln(2b_{n-1}(t)) \\ x_1(t) + x_2(t) + \dots + x_n(t) = nct + \sum_{k=1}^n x_k(0) \end{cases} \quad (2.11)$$

Este sistema é equivalente ao sistema matricial:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & -1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & \dots & 1 & 1 \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_{n-1}(t) \\ x_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \ln(2b_1(t)) \\ 2 \ln(2b_2(t)) \\ \vdots \\ 2 \ln(2b_{n-1}(t)) \\ nct + \sum_{k=1}^n x_k(0) \end{pmatrix}.$$

Usando a propriedade de multilinearidade da função determinante, é fácil verificar que $\det(A) = n$ (ordem da matriz A), ou seja, A é não singular, justificando a obtenção das variáveis $x_k(t)$ ($k = 1 : n$).

A seguir investigamos a existência e unicidade de soluções locais (globais) para o sistema (2.4) com condições iniciais $a_k(0)$ ($k = 1 : n$) e $b_k(0)$ ($k = 1 : n - 1$), ou seja, para o sistema (2.5) em que L_0 é tridiagonal e simétrica.

Pelos teoremas 1.10 e 1.12, a solução do PVI (2.5) existe e é única numa vizinhança $(-\epsilon, \epsilon)$, intervalo maximal, da origem. Assim, $L(t)$ e, conseqüentemente, $B(t)$ estão bem definidas nessa vizinhança.

Lema 2.2. *Considere o PVI*

$$\frac{d}{dt}Q(t) = -Q(t)B(t), \quad Q(0) = I, \quad (2.12)$$

em que $B(t)$, dada em (2.7), está definida em $(-\epsilon, \epsilon)$. Então $Q(t)$, solução do sistema acima, é ortogonal em $(-\epsilon, \epsilon)$.

Demonstração:

Os teoremas 1.10 e 1.12 garantem a existência e unicidade de $Q(t)$ numa vizinhança $(-\tau, \tau)$, maximal, da origem.

Sobre este intervalo,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(Q(t)Q(t)^T) &= \dot{Q}(t)Q(t)^T + Q(t)\dot{Q}(t)^T = \\ &= -Q(t)B(t)Q(t)^T - Q(t)B(t)^TQ(t)^T = 0, \end{aligned}$$

pois $B(t)$ é anti-simétrica.

Logo, $Q(t)Q(t)^T$ é constante em $(-\tau, \tau)$. Como $Q(0)Q(0)^T = I$, segue que $Q(t)$ é ortogonal e, portanto, limitada ($\|Q(t)\|_2 = 1$) neste intervalo. Pelo teorema 1.12, $Q(t)$ é definida e ortogonal em $(-\epsilon, \epsilon)$.

□

Lema 2.3. *Seja $L(t)$ a solução do PVI*

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(t)L(t) - L(t)B(t), \quad L(0) = L_0,$$

em que $L(0)$ simétrica e tridiagonal.

Então, $(\forall t \in (-\epsilon, \epsilon)) L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t)$, em que $Q(t)$ é uma matriz ortogonal dada pelo lema 2.2.

Demonstração:

Seja $(-\epsilon, \epsilon)$ intervalo de definição de $L(t)$ e $Q(t)$.

Já vimos anteriormente que $B(t)L(t) - L(t)B(t)$ é tridiagonal. Portanto, a solução do PVI em questão não pode abandonar o espaço vetorial das matrizes tridiagonais. Evidentemente, $L(t)$ é simétrica.

Agora,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(Q(t)L(t)Q(t)^T) &= \dot{Q}(t)L(t)Q(t)^T + Q(t)\dot{L}(t)Q(t)^T + \\ &+ Q(t)L(t)\dot{Q}(t)^T = -Q(t)B(t)L(t)Q(t)^T + Q(t)[B(t)L(t) - \\ &- L(t)B(t)]Q(t)^T - Q(t)L(t)B(t)^TQ(t)^T = -Q(t)B(t)L(t)Q(t)^T + \\ &+ Q(t)B(t)L(t)Q(t)^T - Q(t)L(t)B(t)Q(t)^T + Q(t)L(t)B(t)Q(t)^T = 0. \end{aligned}$$

Assim, $Q(t)L(t)Q(t)^T = \text{cte} = Q(0)L_0Q(0)^T = L_0$, $\forall t \in (-\epsilon, \epsilon)$.

Portanto $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t) \quad \forall t \in (-\epsilon, \epsilon)$.

□

Corolário 2.4. *O sistema (2.5) tem solução global para qualquer condição inicial L_0 , simétrica e tridiagonal.*

Demonstração:

Pelo corolário 1.12 é suficiente verificar que existe uma limitação para $L(t)$ em $(-\epsilon, \epsilon)$.

Mas, como $\|\cdot\|_2$ é invariante por transformações lineares ortogonais, temos que

$$\|L(t)\|_2 = \|Q(t)^T L_0 Q(t)\|_2 = \|L_0\|_2.$$

□

Assim, acabamos de concluir que as soluções do sistema (2.5) são definidas para todo t .

Corolário 2.5. *Os autovalores de $L(t)$ não dependem de t , isto é, o fluxo é isospectral.*

Demonstração:

Pelo lema 2.3, $L(t)$ é conjugada a L_0 . Portanto, $(\forall t) \lambda(L(t)) = \lambda(L_0)$.

□

Agora, vamos analisar o comportamento assintótico das soluções do sistema (2.5). Inicialmente faremos uma análise qualitativa do problema.

Da equação diferencial para $a_1(t)$ (a coordenada L_{11} em (2.6)),

$$\dot{a}_1(t) = 2b_1(t)^2,$$

vemos que $a_1(t)$ aumenta com o tempo, pois a taxa de variação é não negativa. Como $L(t)$ é conjugada a L_0 , $a_1(t)$ deve permanecer limitada. Isso diz que a velocidade de crescimento de $a_1(t)$, dada por $2b_1(t)^2$, deve tender a zero. Um argumento análogo nos faria concluir que $b_2(t)$ vai a zero, e assim sucessivamente, até obtermos que, quando $t \rightarrow \infty$, $L(t)$ converge a uma matriz diagonal.

Os resultados seguintes tornam essas idéias *mais precisas*.

Lema 2.6. *O sinal de $b_k(t)$ é constante. Em particular, se $b_k(0) = 0$ então $b_k(t) = 0$ ($\forall t$).*

Demonstração:

$b_k(t)$ satisfaz a equação diferencial $\dot{b}_k(t) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t))$ que, obviamente, admite a solução constante zero. Portanto, se $b_k(0) = 0$ então $b_k(t) = 0$ ($\forall t$).

Agora, se $b_k(t_0) > 0$ para algum t_0 então $b_k(t) > 0$ ($\forall t$), pois duas soluções quaisquer do problema de valor inicial não se interceptam.

□

Observação 2.7. *Este lema afirma que se algum $b_k(t)$ é zero inicialmente então o sistema (2.4) se parte em dois sistemas completamente independentes. Portanto, sem perda de generalidade, basta estudar evoluções cujos $b_k(t)$ iniciais são não nulos.*

Definição 2.8. *Uma matriz $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simétrica, tridiagonal, com $L_{ij} \neq 0$, $|i - j| = 1$, é dita uma **matriz de Jacobi**.*

Lema 2.9. *Todos os autovalores de uma matriz de Jacobi são distintos, ou seja, uma matriz de Jacobi tem espectro simples.*

Demonstração:

Sejam L uma matriz de Jacobi e $\lambda \in \mathbb{R}$ qualquer, com

$$(L - \lambda I) = \begin{pmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & & & & \\ b_1 & a_2 - \lambda & b_2 & & & \\ & b_2 & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & & b_{n-1} & \\ & & & b_{n-1} & a_n - \lambda & \end{pmatrix}.$$

Como $b_i \neq 0$ ($\forall i = 1 : n - 1$), é fácil ver que as $(n - 1)$ primeiras colunas de L são linearmente independentes, ou seja, $\text{posto}(L - \lambda I) \geq n - 1$.

Portanto, se λ é um autovalor de L então $\dim(\text{Im}(L - \lambda I)) = \text{posto}(L - \lambda I) = n - 1$, ou seja, $\dim(\text{Núcleo}(L - \lambda I)) = 1$. Como L é diagonalizável segue que todo autovalor de L tem multiplicidade algébrica 1 (pois, multiplicidade algébrica de λ é igual à multiplicidade geométrica de λ). Consequentemente o espectro de L é simples. □

O seguinte teorema retrata o comportamento assintótico da solução do sistema (2.5), $L(t)$.

Teorema 2.10 (Teorema do comportamento assintótico). *Seja $L(t)$ a solução de (2.5). Então $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} L(t) = L(\pm\infty)$ é uma matriz diagonal. Ademais, se $L(0)$ é uma matriz de Jacobi então, as entradas de $L(\infty)$ ($L(-\infty)$) aparecem em ordem decrescente (crescente), e são exatamente os autovalores de $L(0)$.*

Demonstração:

Vamos demonstrar o caso $t \rightarrow \infty$. O caso $t \rightarrow -\infty$ é análogo.

Já vimos que $\|L(t)\|_2 = \|L_0\|_2$.

Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, obtemos:

$$|L_{ij}(t)| = | \langle L(t)e_j, e_i \rangle | \leq \|L(t)\|_2 \|e_i\|_2 \|e_j\|_2 = \|L_0\|_2,$$

ou seja, $|L_{ij}(t)| \leq \|L_0\|_2 = C \quad (\forall i, j = 1 : n)$.

Agora, vamos mostrar que $b_1(t)$ tende a zero quando $t \rightarrow +\infty$.

Da equação para a evolução de $b_1(t)$, $\dot{b}_1(t) = b_1(t)(a_2(t) - a_1(t))$, obtemos:

$$\begin{aligned} |\dot{b}_1(t)| &= |b_1(t)|(a_2(t) - a_1(t))| \leq |b_1(t)|(|a_2(t)| + |a_1(t)|) \Rightarrow \\ &\Rightarrow |\dot{b}_1(t)| \leq 2C^2 = D. \end{aligned}$$

Vamos supor, por absurdo, que $b_1(t)$ não tende a zero. Então, existe $\epsilon > 0$ e uma sequência $\{t_k\}$, $t_k \rightarrow \infty$, tal que $|b_1(t_k)| > \epsilon$.

Podemos supor que t_k é escolhido de tal forma que os intervalos

$$I_k = \left(t_k - \frac{\epsilon}{2D}, t_k + \frac{\epsilon}{2D} \right)$$

são disjuntos.

Seja $s \in I_k$. Pelo teorema do valor médio,

$$|b_1(t_k) - b_1(s)| = |\dot{b}_1(\xi)||t_k - s|,$$

em que $\xi \in (t_k, s)$ (ou $\xi \in (s, t_k)$).

Consequentemente, $|b_1(t_k) - b_1(s)| \leq \frac{\epsilon}{2}$.

Portanto,

$$|b_1(s)| \geq |b_1(t_k)| + |b_1(s) - b_1(t_k)| \geq \frac{\epsilon}{2}.$$

Assim, $\forall s \in I_k$ tem-se que $|b_1(s)| \geq \frac{\epsilon}{2}$.

Agora, como $\dot{a}_1(t) = 2b_1(t)^2$, segue que:

$$a_1(t) = a_1(0) + 2 \int_0^t b_1(s)^2 ds.$$

Logo,

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} a_1(t) &= a_1(0) + 2 \int_0^\infty b_1(s)^2 ds \geq a_1(0) + 2 \int_{I_k} b_1(s)^2 ds \geq \\ &\geq a_1(0) + 2 \sum_k \int_{I_k} \frac{\epsilon^2}{4} ds = a_1(0) + \sum_k \frac{\epsilon^3}{2D} = \infty. \end{aligned}$$

Esta desigualdade contradiz o fato que $(\forall t) |a_1(t)| < C$.

Portanto, $b_1(t) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$.

Agora vamos ver que $b_2(t) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$.

Para tanto, consideremos a evolução para $(a_1(t) + a_2(t))$, ou seja,

$$\frac{d}{dt}(a_1 + a_2)(t) = 2b_2(t)^2.$$

$(a_1 + a_2)(t)$ é limitada, pois $|a_1(t) + a_2(t)| \leq 2C$.

$\dot{b}_2(t)$ é limitada, pois $|\dot{b}_2(t)| = |b_2(t)(a_2(t) - a_1(t))| \leq 2C^2 = D$.

Novamente, por absurdo, supomos que $b_2(t)$ não tende a zero. Um argumento análogo ao anterior implicaria uma contradição.

De maneira análoga, obtemos que todos os $b_k(t)$ tendem a zero quando $t \rightarrow \infty$.

Devemos agora garantir que $a_k(t)$ converge quando $t \rightarrow \infty$.

Como $\dot{a}_1(t) = 2b_1(t)^2$, tem-se que $a_1(t)$ é crescente. Este fato e o fato que $L_{11} = a_1(t)$ é limitada implica na convergência de $a_1(t)$, quando $t \rightarrow \infty$.

Agora, $\frac{d}{dt}(a_1 + a_2)(t) = 2b_2(t)^2$ implica que $(a_1 + a_2)(t)$ é crescente. Como $(a_1 + a_2)(t)$

é limitada, segue que $(a_1 + a_2)(t)$ e, conseqüentemente, $a_2(t)$ são convergentes.

Analogamente, $(\forall k)$ $a_k(t)$ converge quando $t \rightarrow \infty$.

Portanto, a matriz $\lim_{t \rightarrow \infty} L(t)$ existe e é, obviamente, uma matriz diagonal.

O corolário 2.5 assegura que os autovalores de $L(t)$ não dependem de t , e são os mesmos de $L(0)$. Como os autovalores de uma matriz dependem continuamente das entradas da matriz, segue que as entradas da diagonal de $L(\infty)$ são os autovalores de $L(0)$.

A seguir verificaremos que, no caso de $L(0)$ ser de Jacobi, as entradas na diagonal de $L(\infty)$ aparecem em ordem decrescente. Pelo lema 2.9, como $L(0)$ é uma matriz de Jacobi, todas as entradas de $L(\infty)$ são distintas.

Supomos que existe k tal que $a_{k+1}(\infty) > a_k(\infty)$.

Sabemos que:

$$\dot{b}_k(t) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)).$$

Logo $\dot{b}_k(t)b_k(t) = b_k(t)^2(a_{k+1}(t) - a_k(t))$ e, assim,

$$\frac{d}{dt}b_k(t)^2 = 2b_k(t)^2(a_{k+1}(t) - a_k(t)).$$

Já que $a_{k+1}(\infty) > a_k(\infty)$, $(\exists T) (\forall t > T)$,

$$a_{k+1}(t) > a_k(t).$$

Assim, $(\forall t > T) \frac{d}{dt}b_k(t)^2 = 2b_k(t)^2(a_{k+1}(t) - a_k(t)) > 0$, ou seja, $(\forall t > T) b_k(t)^2$ é crescente. Isso contraria o fato que $b_k(t) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Portanto, $a_{k+1}(\infty) < a_k(\infty)$ ($k = 1 : n - 1$).

□

A seguir apresentamos alguns conceitos e resultados importantes das matrizes de Jacobi.

Lema 2.11. *Sejam L uma matriz de Jacobi e $L = Q\Lambda Q^T$ uma decomposição espectral de L . Então $e_i^T Q^T e_1 \neq 0$ ($\forall i = 1 : n$), ou seja, a primeira linha da matriz Q é constituída de elementos não nulos.*

Demonstração:

Supomos $e_i^T Q^T e_1 = 0$ para algum i . Seja $v = (0, v_2, \dots, v_n)^T \neq 0$ o autovetor de L ,

cuja primeira coordenada é $e_i^T Q^T e_1$ é nulo. Seja λ o autovalor correspondente. Portanto,

$$Lv = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & b_{n-1} & a_n \\ & & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}.$$

Da primeira linha da identidade acima, segue que $b_1 v_2 = 0$. Logo, $v_2 = 0$, pois, por hipótese, $b_1 \neq 0$ (L é de Jacobi).

Analogamente, segue que $v_3 = \dots = v_n = 0$, ou seja, $v = 0$. (Contradição!)

□

Observação 2.12. Se L é uma matriz de Jacobi, podemos tomar os autovetores de L de tal modo que $e_i^T Q^T e_1 > 0$ ($\forall i = 1 : n$). Além disso, podemos arranjar os autovalores em ordem decrescente, pois, conforme o lema 2.9, L tem espectro simples. Se assim for feito, a decomposição espectral de L será única.

Definição 2.13. Sejam L uma matriz de Jacobi e $L = Q\Lambda Q^T$ a decomposição espectral de L em que $e_i^T Q^T e_1 > 0$ ($\forall i = 1 : n$) e Λ é a matriz de autovalores dispostos em ordem decrescente. Definimos $\mu_1(L) = Q^T e_1$.

Definição 2.14. Seja L uma matriz de Jacobi tal que $L_{i,i+1} = b_i > 0$ ($\forall i = 1 : n - 1$). Matrizes assim são chamadas **matrizes de Jacobi com superdiagonal positiva**.

Definição 2.15. Seja L uma matriz de Jacobi. Definimos $\sigma(L) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$, em que $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$ são os autovalores de L .

Notações:

- [i] \mathbb{T} é o conjunto das matrizes de Jacobi com superdiagonal positiva.
- [ii] \mathbb{T}_σ é o conjunto das matrizes de \mathbb{T} com espectro, $\sigma = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$
 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$, fixo.

[iii] $S_+^{n-1} = \{v \in \mathbb{R}^n; \|v\|_2 = 1; v_i > 0 \ (\forall i = 1 : n)\}$.

Lema 2.16. *Sejam $v = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n$, $v_i > 0 \ (i = 1 : n)$ e*

$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$.

Então a matriz $A = (v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^{n-1} v)$ é não singular.

Demonstração:

$$A = \begin{pmatrix} v_1 & \lambda_1 v_1 & \lambda_1^2 v_1 & \cdots & \lambda_1^{n-1} v_1 \\ v_2 & \lambda_2 v_2 & \lambda_2^2 v_2 & \cdots & \lambda_2^{n-1} v_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_n & \lambda_n v_n & \lambda_n^2 v_n & \cdots & \lambda_n^{n-1} v_n \end{pmatrix} =$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} v_1 & & & & \\ & v_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & & v_n \end{pmatrix}}_{A_1} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & \lambda_1 & \lambda_1^2 & \cdots & \lambda_1^{n-1} \\ 1 & \lambda_2 & \lambda_2^2 & \cdots & \lambda_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \lambda_n & \lambda_n^2 & \cdots & \lambda_n^{n-1} \end{pmatrix}}_{A_2},$$

em que A_2 é de Vandermonde.

Assim, por hipótese,

$$\det(A) = \left(\prod_{i=1}^n v_i \right) \cdot \begin{pmatrix} \prod_{\substack{i, j = 1 \\ i > j}}^n (\lambda_i - \lambda_j) \end{pmatrix} \neq 0.$$

Portanto, A é não singular.

□

Teorema 2.17. *Seja $\sigma = (\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^n$, $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$. A função*

$$\Psi : \mathbb{T}_\sigma \rightarrow S_+^{n-1}$$

$$L \mapsto \mu_1(L)$$

é inversível.

Demonstração:

É evidente que Ψ está bem definida (conforme definição 2.13).

Inicialmente mostramos que Ψ é uma aplicação injetiva.

Sejam L_1 e L_2 em \mathbb{T}_σ tais que $\Psi(L_1) = \Psi(L_2)$.

Portanto, $\mu_1(L_1) = \mu_1(L_2) = \mu_1$.

Façamos $\Lambda = \text{diag}(\sigma)$.

Pelo teorema espectral, $L_1 = Q_1\Lambda Q_1^T$ e $L_2 = Q_2\Lambda Q_2^T$, ou seja,

$$L_1 Q_1 = Q_1 \Lambda \quad \text{e} \quad L_2 Q_2 = Q_2 \Lambda \quad (2.13)$$

Façamos,

$$Q_1 = \begin{pmatrix} \cdots & \mu_1 & \cdots \\ \cdots & q_2 & \cdots \\ & \vdots & \\ \cdots & q_n & \cdots \end{pmatrix}, \quad Q_2 = \begin{pmatrix} \cdots & \mu_1 & \cdots \\ \cdots & \tilde{q}_2 & \cdots \\ & \vdots & \\ \cdots & \tilde{q}_n & \cdots \end{pmatrix},$$

$$L_1 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & & b_{n-1} & \\ & & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad L_2 = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1 & \tilde{b}_1 & & & & \\ \tilde{b}_1 & \tilde{a}_2 & \tilde{b}_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & & \tilde{b}_{n-1} & \\ & & & & \tilde{b}_{n-1} & \tilde{a}_n \end{pmatrix}.$$

Da primeira linha da identidade (2.13), segue que

$$a_1 \mu_1 + b_1 q_2 = \mu_1 \Lambda \quad \text{e} \quad \tilde{a}_1 \mu_1 + \tilde{b}_1 \tilde{q}_2 = \mu_1 \Lambda.$$

Assim,

$$(a_1 - \tilde{a}_1) \mu_1 + b_1 q_2 - \tilde{b}_1 \tilde{q}_2 = 0.$$

Fazendo o produto interno com μ_1 e pelo fato de Q_1 e Q_2 serem ortogonais, tem-se que $a_1 = \tilde{a}_1$.

Deste modo, $b_1 q_2 = \tilde{b}_1 \tilde{q}_2$.

Logo, $\|b_1 q_2\|_2 = \|\tilde{b}_1 \tilde{q}_2\|_2$, ou seja, $|b_1| = |\tilde{b}_1|$.

Como L_1 e L_2 pertencem a \mathbb{T}_σ , temos que b_1 e \tilde{b}_1 são positivos. Assim, $b_1 = \tilde{b}_1$.

Consequentemente, $q_2 = \tilde{q}_2$.

Da segunda linha da identidade (2.13), segue que

$$b_1\mu_1 + a_2q_2 + b_2q_3 = q_2\Lambda \quad \text{e} \quad \tilde{b}_1\mu_1 + \tilde{a}_2\tilde{q}_2 + \tilde{b}_2\tilde{q}_3 = \tilde{q}_2\Lambda.$$

Logo,

$$b_1\mu_1 + a_2q_2 + b_2q_3 = q_2\Lambda \quad \text{e} \quad b_1\mu_1 + \tilde{a}_2q_2 + \tilde{b}_2\tilde{q}_3 = q_2\Lambda.$$

Assim,

$$(a_2 - \tilde{a}_2)q_2 + b_2q_3 - \tilde{b}_2\tilde{q}_3 = 0.$$

Como antes, segue que $a_2 = \tilde{a}_2$, $b_2 = \tilde{b}_2$ e $q_3 = \tilde{q}_3$.

Analogamente, obtemos $a_i = \tilde{a}_i$ ($i = 1 : n$) e $b_i = \tilde{b}_i$ ($i = 1 : n - 1$).

Logo $L_1 = L_2$ e, portanto, Ψ é injetiva.

Agora, vamos verificar a sobrejetividade de Ψ .

Seja $v \in \mathbb{S}_+^{n-1}$. Devemos mostrar que existe L em \mathbb{T}_σ tal que $\Psi(L) = \mu_1(L) = v$.

Para tanto, considere $\Lambda = \text{diag}(\sigma)$ e $A = (v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^{n-1} v)$.

Pelo lema 2.16 A é não singular.

Seja $A = QR$ fatoração QR de A (única) conforme teorema 1.4.

Definimos $L = Q^T \Lambda Q$ e afirmamos que $\mu_1(L) = v$.

Evidentemente, L é simétrica e o espectro de L é dado pelas componentes de σ .

Considere a decomposição espectral de L , $L = U\Lambda U^T$, em que a primeira linha de U é positiva. Já observamos que tal decomposição é única. Como $Q^T e_1 = v$, segue que $Ue_1 = v$ e, conseqüentemente, $\mu_1(L) = v$.

Agora, resta mostrar que L é tridiagonal e $L_{i,i+1} > 0$ ($i = 1 : n - 1$).

Sejam $i, j \in \mathbb{N}$ tais que $i - j > 1$. Mostraremos que $L_{ij} = 0$.

Pela observação 1.5 sabemos que a matriz Q é obtida por aplicar o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt as colunas de A .

Logo, $Qe_j \in \text{span}\{v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^{j-1} v\}$ (Qe_j é combinação linear das j primeiras colunas de A).

Assim, $\Lambda Qe_j \in \text{span}\{v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^j v\}$.

Como $i - j > 1$ segue que $i - 2 \geq j$.

Portanto, $\Lambda Qe_j \in \text{span}\{v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^{i-2} v\}$.

Por Gram-Schmidt,

$$Qe_i \perp \text{span}\{Qe_1, Qe_2, \dots, Qe_{i-1}\} = \text{span}\{v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^{i-1} v\}.$$

Deste modo, $(Qe_i)^T(\Lambda Qe_j) = 0$, ou seja, $L_{ij} = 0$.

Assim, L é tridiagonal.

Finalmente, mostraremos que $L_{i,i+1} > 0$ ($i = 1 : n - 1$).

Vejamos:

$$L_{i,i+1} = e_{i+1}^T Q^T \Lambda Q e_i = (Qe_{i+1})^T \Lambda Q e_i.$$

Novamente, por Gram-Schmidt, $Qe_i = \sum_{k=0}^{i-1} c_k \Lambda^k v$ $c_{i-1} = 1$.

Além disso, Qe_{i+1} é ortogonal a $\text{span}\{v, \Lambda v, \Lambda^2 v, \dots, \Lambda^i v\} = \text{span}\{Qe_1, Qe_2, \dots, Qe_i\}$.

Portanto,

$$(Qe_{i+1})^T \Lambda Q e_i = (Qe_{i+1})^T \left(\sum_{k=0}^{i-1} c_k \Lambda^{k+1} v \right) = (Qe_{i+1})^T c_{i-1} \Lambda^i v = (Qe_{i+1})^T \Lambda^i v.$$

Como $A = QR$, segue que $Q^T A = R$.

Além disso,

$$\begin{aligned} \Lambda^i v = Ae_{i+1} &\Rightarrow (Qe_{i+1})^T \Lambda^i v = (Qe_{i+1})^T Ae_{i+1} = \\ &= e_{i+1}^T (Q^T A) e_{i+1} = e_{i+1}^T R e_{i+1} = R_{i+1,i+1} > 0. \end{aligned}$$

Logo, $L_{i,i+1} > 0$ ($i = 1 : n - 1$).

Portanto, Ψ é sobrejetora. □

Observação 2.18. *Este teorema será importante no capítulo 3 para verificar a conexão entre fluxos em \mathbb{T} e o método QR. Um fato importante é que Ψ é um difeomorfismo. A demonstração pode ser encontrada em [3].*

Os resultados seguintes apresentam uma maneira de resolver explicitamente o sistema (2.5), ou seja, a equação de Toda.

Sabemos, do lema 2.6, que se L_0 é de Jacobi então $(\forall t)L(t)$ é de Jacobi. De posse desse resultado podemos enunciar o seguinte lema:

Lema 2.19. *Sejam $L(t)$ solução do sistema (2.5) com L_0 de Jacobi e $\mu(t) = \mu_1(L(t))$ (conforme definição 2.13). Então:*

$$\dot{\mu}(t) = \Lambda \mu(t) - \langle \Lambda \mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t)$$

Demonstração:

Seja $L(t) = U(t)\Lambda U(t)^T$ a decomposição espectral de $L(t)$ (de tal forma que Λ possui entradas em ordem decrescente e o sinal das componentes de $\mu(t) = \mu_1(L(t)) = U(t)^T e_1$ são positivos).

Pelo lema 2.3 , $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t)$, em que $\dot{Q}(t) = -Q(t)B(t)$, $Q(0) = I$. Claramente, $L(0) = U(0)\Lambda U(0)^T$.

Assim, $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t) = Q(t)^T U(0)\Lambda U(0)^T Q(t)$.

Tendo em vista que as entradas da diagonal de Λ estão dispostos em ordem decrescente, segue que $U(t)I_{\delta(t)} = Q(t)^T U(0)$, em que:

$$I_{\delta(t)} = \begin{pmatrix} \pm 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Como $(\forall t)$ $L(t)$ é de Jacobi, o lema (2.11) garante que $e_i^T U(t) e_i \neq 0$ ($i = 1 : n$) $(\forall t)$. Esse fato e o teorema do valor intermediário garantem que $I_{\delta(t)}$ é constante, ou seja, $(\forall t)$ $I_{\delta(t)} = I_\delta$.

Assim, $U(t)I_\delta = Q(t)^T U(0)$, ou equivalentemente, $U(t)^T = I_\delta U(0)^T Q(t)$.

Derivando em relação à variável t , obtemos:

$$\dot{U}(t)^T = I_\delta U(0)^T \dot{Q}(t) = -I_\delta U(0)^T Q(t) B(t) = U(t)^T B(t)^T.$$

Agora, $B(t) = L(t) - R(t)$, em que:

$$R(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) & 0 & & & \\ 2b_1(t) & a_2(t) & 0 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 0 \\ & & & & 2b_{n-1}(t) & a_n(t) \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} \dot{U}(t)^T &= U(t)^T B(t)^T = U(t)^T (L(t) - R(t))^T = \\ &= U(t)^T L(t) - U(t)^T R(t)^T = \Lambda U(t)^T - U(t)^T R(t)^T. \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\dot{U}(t)^T e_1 = \Lambda U(t)^T e_1 - U(t)^T R(t)^T e_1 = \Lambda U(t)^T e_1 - U(t)^T a_1(t) e_1.$$

Agora,

$$a_1(t) = e_1^T L(t) e_1 = e_1^T U(t) \Lambda U(t)^T e_1 = \langle \Lambda U(t)^T e_1, U(t)^T e_1 \rangle = \langle \Lambda \mu(t), \mu(t) \rangle.$$

Portanto,

$$\dot{\mu}(t) = \Lambda \mu(t) - \langle \Lambda \mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t).$$

□

Lema 2.20. *Seja $A \in \mathbb{R}$ uma matriz constante qualquer. Seja $\mu(t)$ solução do PVI*

$$\begin{aligned} \dot{\mu}(t) &= A\mu(t) - \langle A\mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t), \quad \|\mu(t)\|_2 = 1; \\ \mu(0) &= \mu_0, \quad \|\mu(0)\|_2 = 1. \end{aligned}$$

Então,

$$\mu(t) = \frac{\exp(At)\mu(0)}{\|\exp(At)\mu(0)\|_2}.$$

Em outras palavras, a solução $\mu(t)$ do PVI não linear acima é obtido normalizando a solução do PVI linear:

$$\dot{\mu}(t) = A\mu(t), \quad \mu(0) = \mu_0.$$

Demonstração:

Seja $\mu(t) = \exp(At)\mu(0)$ tal que

$$\dot{\mu}(t) = A\mu(t), \quad \mu(0) = \mu_0.$$

Então,

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\mu(t)}{(\mu^T(t)\mu(t))^{\frac{1}{2}}} \right] = \frac{\dot{\mu}(t)\|\mu(t)\|_2 - \mu(t) \frac{d}{dt} \left[(\mu^T(t)\mu(t))^{\frac{1}{2}} \right]}{\|\mu(t)\|_2^2}.$$

Agora,

$$\frac{d}{dt} \left[(\mu^T(t)\mu(t))^{\frac{1}{2}} \right] = \frac{\mu^T(t)\dot{\mu}(t)}{\|\mu(t)\|_2}.$$

Assim,

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\mu(t)}{(\mu^T(t)\mu(t))^{\frac{1}{2}}} \right] = \frac{A\mu(t)}{\|\mu(t)\|_2} - \frac{[\mu^T(t)A\mu(t)] \mu(t)}{\|\mu(t)\|_2^3},$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\mu(t)}{(\mu^T(t)\mu(t))^{\frac{1}{2}}} \right] = A \frac{\mu(t)}{\|\mu(t)\|_2} - \left\langle A \frac{\mu(t)}{\|\mu(t)\|_2}, \frac{\mu(t)}{\|\mu(t)\|_2} \right\rangle \frac{\mu(t)}{\|\mu(t)\|_2},$$

verificando, assim, o resultado. □

Corolário 2.21. *A solução da equação diferencial do lema 2.19 é dada por:*

$$\mu_1(L(t)) = \frac{\exp(t\Lambda)\mu_1(L(0))}{\|\exp(t\Lambda)\mu_1(L(0))\|_2}.$$

Demonstração:

Basta fazer $A = \Lambda$ no lema 2.20. □

Observação 2.22. *Para resolver a equação de Toda (sistema (2.5)) com condição inicial L_0 (a priori, matriz de Jacobi com superdiagonal positiva), basta obter as variáveis espectrais correspondentes a L_0 ($\sigma(L_0), \mu_1(L_0)$), calcular sua evolução e recuperar $L(t)$ a partir das novas variáveis inversas, ou seja, uma vez obtidos os autovalores e autovetores de L_0 , resolvemos explicitamente a equação de Toda.*

2.2 Generalização do Fluxo de Toda

Nesta seção apresentamos uma generalização natural do fluxo de Toda. Consideramos fluxos no espaço vetorial das matrizes tridiagonais mais gerais. Os resultados obtidos para o fluxo de Toda são estendidos para estes fluxos.

Lema 2.23. *Sejam $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e tridiagonal, $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica que comuta com L e $B = (G_+) - (G_-)$, em que (G_+) e (G_-) são as partes estritamente superior e inferior, respectivamente, de G . Então, $BL - LB$ é tridiagonal.*

Demonstração:

Sejam $G = (g_{ij})$,

$$\begin{aligned}
 & (0, \dots, 0, \underbrace{b_{i+k-1}}_{i+k-1}, \underbrace{a_{i+k}}_{i+k}, \underbrace{b_{i+k}}_{i+k+1}, 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{g_{ii}}_i, \underbrace{2g_{i,i+1}}_{i+1}, \dots, 2g_{in})^T - \\
 & - (2g_{i+k,1}, \dots, 2g_{i+k,i+k-1}, \underbrace{g_{i+k,i+k}}_{i+k}, 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{b_{i-1}}_{i-1}, \underbrace{a_i}_i, b_i, 0, \dots, 0)^T = \\
 & = 2b_{i+k-1}g_{i,i+k-1} + 2a_{i+k}g_{i,i+k} + 2b_{i+k}g_{i,i+k+1} - \\
 & - 2g_{i+k,i-1}b_{i-1} - 2g_{i+k,i}a_i - 2g_{i+k,i+1}b_i.
 \end{aligned}$$

Por hipótese, $LG = GL$.

Assim, $e_{i+k}^T LGe_i = e_{i+k}^T GLe_i$ ($i = 1 : n$, $2 \leq k \leq n - i$).

Agora,

$$\begin{aligned}
 e_{i+k}^T LGe_i &= (0, \dots, 0, \underbrace{b_{i+k-1}}_{i+k-1}, \underbrace{a_{i+k}}_{i+k}, \underbrace{b_{i+k}}_{i+k+1}, 0, \dots, 0) \cdot (g_{1i}, \dots, g_{ii}, g_{i+1,i}, \dots, g_{ni})^T = \\
 & = b_{i+k-1}g_{i+k-1,i} + a_{i+k}g_{i+k,i} + b_{i+k}g_{i+k+1,i}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 e_{i+k}^T GLe_i &= (g_{i+k,1}, \dots, \underbrace{g_{i+k,i+k}}_{i+k}, \dots, g_{i+k,n}) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{b_{i-1}}_{i-1}, \underbrace{a_i}_i, b_i, 0, \dots, 0) = \\
 & = b_{i-1}g_{i+k,i-1} + a_i g_{i+k,i} + b_i g_{i+k,i+1}.
 \end{aligned}$$

Assim, como G é simétrica,

$$\begin{aligned}
 & b_{i+k-1}g_{i,i+k-1} + a_{i+k}g_{i,i+k} + b_{i+k}g_{i,i+k+1} - \\
 & - g_{i+k,i-1}b_{i-1} - g_{i+k,i}a_i - g_{i+k,i+1}b_i = 0.
 \end{aligned}$$

Logo, $e_{i+k}^T (LR - RL)e_i = 0$ ($i = 1 : n$, $2 \leq k \leq n - i$).

Portanto $(LR - RL)$ e, conseqüentemente, $(BL - LB)$ é tridiagonal.

□

Definição 2.24. Seja $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tridiagonal e simétrica. Seja $G(\lambda)$ uma função real, analítica e injetiva num domínio aberto que contém o espectro de L . Definimos $B = (G(L)_+) - (G(L)_-)$, em que $(G(L)_+)$ e $(G(L)_-)$ são as partes estritamente superior e inferior, respectivamente, de $G(L)$.

É evidente que B é anti-simétrica, pois

$$B^T = [(G(L)_+) - (G(L)_-)]^T = (G(L)_-) - (G(L)_+) = -B.$$

Como L é simétrica, segue pelo teorema 1.14 que $G(L)$ é simétrica e comuta com L . Portanto, pelo lema 2.23 segue que $BL - LB$ é tridiagonal, em que $B = (G(L)_+) - (G(L)_-)$.

Agora, considere o sistema:

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t))), \quad L(0) = L_0. \quad (2.14)$$

Pelo teorema 1.10, a solução do PVI (2.14) existe e é única numa vizinhança $(-\epsilon, \epsilon)$ da origem. Consequentemente, como $G(\lambda)$ está definida no espectro de $L(t)$, segue que $B(G(L(t)))$ está bem definida nessa vizinhança.

Lema 2.25. *Considere o PVI*

$$\frac{d}{dt}Q(t) = -Q(t)B(G(L(t))), \quad Q(0) = I, \quad (2.15)$$

$B(t)$ como na definição 2.24. Então existe um intervalo $(-\delta, \delta)$, de definição de $Q(t)$, no qual $Q(t)$ é unitária.

Demonstração:

Análoga à demonstração do lema 2.2, observando que $B(G(L(t)))$ é anti-simétrica. □

Lema 2.26. *Seja $L(t)$ a solução do PVI*

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t))), \quad L(0) = L_0,$$

em que $L(0)$ simétrica e tridiagonal.

Então, $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t)$, em que $Q(t)$ é uma matriz ortogonal dada pelo lema 2.25, anterior.

Demonstração:

Análoga à demonstração do lema 2.3, observando que

$B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t)))$ é tridiagonal (conforme lema 2.23) □

Corolário 2.27. *O sistema (2.14) tem solução global para qualquer condição inicial L_0 , simétrica e tridiagonal. Além disso, os autovalores de $L(t)$ não dependem de t , isto é, o fluxo definido pelo sistema (2.14) é isospectral.*

Demonstração:

Análoga à demonstração dos lemas 2.4-2.5.

□

A seguir apresentamos alguns resultados que serão importantes para verificar como a solução do sistema (2.14) se comporta assintoticamente. Considere o sistema:

$$\frac{d}{dt}L(t) = B(t)L(t) - L(t)B(t), \quad L(0) = L_0, \quad (2.16)$$

obtido por fazer $G(\lambda) = \lambda$ no sistema (2.14) e $L(t)$ é simétrica genérica. Neste caso $B(t) = (L(t)_+) - (L(t)_-)$.

Os lemas 2.25-2.26 e o corolário 2.27 acima também são válidos para o sistema (2.16). As demonstrações são idênticas.

Os próximos dois resultados mostram que as soluções do sistema (2.16) convergem, quando $t \rightarrow \infty$, para matrizes diagonais.

Lema 2.28. *Seja f uma função de Lipschitz e de quadrado integrável em \mathbb{R} . Então*

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |f(t)| = 0$$

Demonstração:

Supomos que $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |f(t)| > 0$. Então existe $\epsilon > 0$ e uma sequência $\{t_k\}$, $t_k \rightarrow \infty$, tal que

$$|f(t_k)| > \epsilon \quad (\forall k \geq 1).$$

Podemos supor que t_k é escolhido de maneira que os intervalos

$$I_k = \left(t_k - \frac{\epsilon}{2M}, t_k + \frac{\epsilon}{2M} \right)$$

são disjuntos. M é a constante de Lipschitz para f .

Agora, $\forall t \in I_k$, tem-se

$$|f(t) - f(t_k)| \leq M|t - t_k| \leq M \frac{\epsilon}{2M} = \frac{\epsilon}{2}$$

e, portanto,

$$|f(t)| \geq |f(t_k)| - |f(t) - f(t_k)| \geq \frac{\epsilon}{2}$$

Logo,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt \geq \sum_k \int_{I_k} |f(t)|^2 dt \geq$$

$$\geq \sum_k \int_{I_k} \frac{\epsilon^2}{4} dt = \sum_k \frac{\epsilon^2}{4} \frac{\epsilon}{M} = \infty,$$

o que contradiz a hipótese de f ser quadrado integrável.

Portanto, $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |f(t)| = 0$.

□

Teorema 2.29. *Seja $L(t)$ a solução de (2.16), com $B(t) = (L(t)_+) - (L(t)_-)$. Então $\lim_{t \rightarrow \infty} L(t) = L(\infty)$ existe. Além disso, $L(\infty)$ é diagonal consistindo de autovalores de L_0 .*

Demonstração:

Sejam

$$L(t) = \begin{pmatrix} L_{11}(t) & L_{12}(t) & \cdots & L_{1n}(t) \\ L_{21}(t) & L_{22}(t) & \cdots & L_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{n1}(t) & L_{n2}(t) & \cdots & L_{nn}(t) \end{pmatrix}$$

e

$$B(t) = \begin{pmatrix} 0 & L_{12}(t) & \cdots & L_{1n}(t) \\ -L_{21}(t) & 0 & \cdots & L_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -L_{n1}(t) & -L_{n2}(t) & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L_{kk}(t) &= e_k^T B(t) L(t) e_k - e_k^T L(t) B(t) e_k = \\ &= (-L_{k1}, \dots, -L_{k,k-1}, 0, L_{k,k+1}, \dots, L_{kn}) \cdot (L_{1k}, \dots, L_{k-1,k}, L_{kk}, L_{k+1,k}, \dots, L_{nk})^T - \\ &= (L_{k1}, \dots, L_{k,k-1}, L_{kk}, L_{k,k+1}, \dots, L_{kn}) \cdot (L_{1k}, \dots, L_{k-1,k}, 0, -L_{k+1,k}, \dots, -L_{nk})^T = \\ &= 2(L_{k,k+1}^2(t) + \dots + L_{kn}^2(t)) - 2(L_{k1}^2(t) + \dots + L_{k,k-1}^2(t)) = \\ &= 2 \sum_{j=k+1}^n L_{kj}^2(t) - 2 \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}^2(t) \quad (k = 1 : n), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}L_{kk}(t) = 2 \sum_{j=k+1}^n L_{kj}^2(t) - 2 \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}^2(t) \quad (k = 1 : n). \quad (2.17)$$

Logo, para $1 \leq m \leq n$, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^m L_{kk}(t) &= 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=k+1}^n L_{kj}^2(t) - 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}^2(t) = \\ &= 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=k}^n L_{kj}^2(t) - 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^k L_{kj}^2(t). \end{aligned}$$

Agora,

$$\sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^k L_{kj}^2(t) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=k}^m L_{kj}^2(t) \quad (\text{indução sobre } m).$$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^m L_{kk}(t) &= 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=k}^n L_{kj}^2(t) - 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=k}^m L_{kj}^2(t) = \\ &= 2 \sum_{k=1}^m \left(\sum_{j=k}^n L_{kj}^2(t) - \sum_{j=k}^m L_{kj}^2(t) \right) = 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=m+1}^n L_{kj}^2(t). \end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{d}{dt} \sum_{k=1}^m L_{kk}(t) = 2 \sum_{k=1}^m \sum_{j=m+1}^n L_{kj}^2(t) \geq 2 \sum_{j=m+1}^n L_{mj}^2(t) \quad (1 \leq m \leq n). \quad (2.18)$$

Já vimos que $(\forall t) \|L(t)\|_2 = \|L_0\|_2$.

Além disso,

$$\left\| \frac{d}{dt} L(t) \right\|_2 = \|B(t)L(t) - L(t)B(t)\|_2 \leq 2\|L_0\|_2^2.$$

Assim, $L(t)$ e $\frac{d}{dt}L(t)$ são limitadas. Em particular, $L_{mj}(t)$ é Lipschitz, pois $\frac{d}{dt}L_{mj}(t)$ é limitada.

Utilizando (2.18), para $(1 \leq m \leq n)$ e $(m+1 \leq j \leq n)$, obtemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} L_{mj}^2(t) dt \leq \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j=m+1}^n L_{mj}^2(t) dt \leq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^m L_{kk}(t) dt =$$

$$= \lim_{\substack{a \rightarrow \infty \\ b \rightarrow -\infty}} \sum_{k=1}^m \int_b^a \frac{d}{dt} L_{kk}(t) dt = \lim_{\substack{a \rightarrow \infty \\ b \rightarrow -\infty}} \sum_{k=1}^m (L_{kk}(a) - L_{kk}(b)) \leq \sum_{k=1}^m 2\|L_0\|_2 < \infty.$$

Portanto, para $(1 \leq m \leq n)$ e $(m+1 \leq j \leq n)$, $L_{mj}(t)$ é quadrado integrável. Pelo lema 2.28, para $(1 \leq m \leq n)$ e $(m+1 \leq j \leq n)$,

$$|L_{mj}(t)| \rightarrow 0, \quad \text{quando } t \rightarrow \infty.$$

Assim, $L_{ij} \rightarrow 0$ ($i \neq j$), quando $t \rightarrow \infty$.

Agora verificaremos que $(\forall k = 1 : n) \lim_{t \rightarrow \infty} L_{kk}(t)$ existe.

$L_{11}(t)$ é crescente, pois, por (2.18),

$$\frac{d}{dt} L_{11}(t) \geq 2 \sum_{j=2}^n L_{1j}(t)^2 \geq 0 \quad (\forall t).$$

Como $L_{11}(t)$ é limitada, segue que $\lim_{t \rightarrow \infty} L_{11}(t) < \infty$.

$L_{11}(t) + L_{22}(t)$ é crescente, pois, por (2.18),

$$\frac{d}{dt} (L_{11}(t) + L_{22}(t)) \geq 2 \sum_{j=3}^n L_{2j}(t)^2 \geq 0 \quad (\forall t).$$

Como $L_{11}(t) + L_{22}(t)$ é limitada, segue que $\lim_{t \rightarrow \infty} (L_{11}(t) + L_{22}(t)) < \infty$. Consequentemente, $\lim_{t \rightarrow \infty} L_{22}(t) < \infty$.

Seguindo este raciocínio, observamos que $\lim_{t \rightarrow \infty} L_{kk}(t) = L(\infty)$ é diagonal.

Agora, como $L(t)$ é isospectral e os autovalores de uma matriz dependem continuamente das entradas da matriz, segue que $\lambda(L(\infty)) = \lambda(L_0)$

□

De posse desse resultado, podemos analisar o comportamento assintótico das soluções do sistema (2.14). Vejamos:

Teorema 2.30. *Seja $L(t)$ solução do sistema (2.14). Seja F uma função real, analítica e definida no espectro de L_0 . Então $F(L(t))$ é solução de:*

$$\frac{d}{dt} X(t) = B(G(L(t)))X(t) - X(t)B(G(L(t))), \quad X(0) = F(L_0). \quad (2.19)$$

Demonstração:

Já sabemos que $(\forall t) L(t)$ é simétrica e isospectral. Pelo teorema 1.17, $F(L(t))$ é um

polinômio que depende do espectro de $L(t)$. Como o espectro de $L(t)$ é preservado, tal polinômio é constante em t .

Por linearidade, basta verificar o resultado para $p(\lambda) = \lambda^n$.

Usaremos indução sobre n .

Por hipótese, $p(L(t)) = L(t)$ resolve

$$\frac{d}{dt}X(t) = B(G(X(t)))X(t) - X(t)B(G(X(t))), \quad X(0) = L_0.$$

Assim, o resultado se verifica para $n = 1$.

Supomos, por hipótese de indução, que $p(L(t)) = L^n(t)$ resolve (2.19).

Logo,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}L^{n+1}(t) &= \left(\frac{d}{dt}L^n(t)\right)L(t) + L^n(t)\left(\frac{d}{dt}L(t)\right) = \\ &= [(B(G(L(t)))L^n(t) - L^n(t)B(G(L(t))))L(t) + \\ &\quad + L^n(t)[B(G(L(t)))L(t) - L(t)B(G(L(t)))] = \\ &= B(G(L(t)))L^{n+1}(t) - L^n(t)B(G(L(t)))L(t) + \\ &\quad + L^n(t)B(G(L(t)))L(t) - L^{n+1}(t)B(G(L(t))) = \\ &= B(G(L(t)))L^{n+1}(t) - L^{n+1}(t)B(G(L(t))). \end{aligned}$$

Portanto, $p(L(t)) = L^{n+1}(t)$ resolve (2.19).

□

Corolário 2.31. *Seja $L(t)$ solução do sistema (2.14). Se $F = G$, no teorema acima, então $G(L(t))$ resolve o sistema:*

$$\frac{d}{dt}X(t) = B(X(t))X(t) - X(t)B(X(t)), \quad X(0) = G(L_0).$$

Demonstração:

Aplicação direta do teorema acima.

□

Corolário 2.32. *Se G é injetiva num domínio aberto que contém o espectro de L_0 , então a solução do sistema (2.14) converge para uma matriz diagonal quando $t \rightarrow \pm\infty$.*

$$\begin{aligned}
& -(2g_{i1}(t), \dots, 2g_{i,i-1}(t), \underbrace{g_{ii}(t)}_i, 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{b_i(t)}_i, a_{i+1}(t), b_{i+1}(t), 0, \dots, 0)^T = \\
& = b_i(t)g_{i+1,i+1}(t) - b_i(t)g_{i,i}(t) = b_i(t)(g_{i+1,i+1}(t) - g_{i,i}(t)).
\end{aligned}$$

Evidentemente, $b_i(t) \equiv 0$ é solução de

$$\dot{b}_i(t) = b_i(t)(g_{i+1,i+1}(t) - g_{i,i}(t)).$$

Logo, se $b_i(0) = 0$ segue, pelo teorema de Picard, que $b_i(t) \equiv 0$. Por outro lado, se $b_k(t_0) > 0$ para algum t_0 , então $(\forall t) \quad b_k(t) > 0$, pois duas soluções do PVI (2.14) não se interceptam.

□

Observação 2.34. Se L_0 é de Jacobi com superdiagonal positiva então $(\forall t) \quad L(t)$ é também de Jacobi com superdiagonal positiva.

Lema 2.35. Sejam $L(t)$ solução do PVI (2.23), com L_0 de Jacobi, e $\mu(t) = \mu_1(L(t))$ (conforme definição 2.13). Então:

$$\dot{\mu}(t) = G(\Lambda)\mu(t) - \langle G(\Lambda)\mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t).$$

Demonstração:

Seja $L(t) = U(t)\Lambda U(t)^T$ a decomposição espectral de $L(t)$ (de tal forma que Λ possui entradas em ordem decrescente e o sinal das componentes de $\mu(t) = \mu_1(L(t)) = U(t)^T e_1$ são positivas).

Pelo lema 2.26, $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t)$, em que $\dot{Q}(t) = -Q(t)B(G(L(t)))$, $Q(0) = I$. Evidentemente, $L(0) = U(0)\Lambda U(0)^T$.

Logo, $L(t) = Q(t)^T L_0 Q(t) = Q(t)^T U(0)\Lambda U(0)^T Q(t)$.

Como na demonstração do lema 2.19 , segue que $U(t) = Q(t)^T U(0)I_\delta$, em que:

$$I_\delta = \begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Derivando em relação à variável t , obtemos:

$$\dot{U}(t) = \dot{Q}(t)^T U(0)I_\delta = -B(G(L(t)))^T Q(t)^T U(0)I_\delta = B(G(L(t)))^T U(t),$$

ou seja,

$$\dot{U}(t) = B(G(L(t)))^T U(t).$$

Agora, $B(G(L(t))) = G(L(t)) - R(t)$, em que $G(L) = [g_{ij}]$ e

$$R(t) = \begin{pmatrix} g_{11}(t) & & & & \\ 2g_{12}(t) & g_{22}(t) & & & \\ 2g_{13}(t) & 2g_{23}(t) & g_{33}(t) & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 2g_{1n}(t) & 2g_{2n}(t) & 2g_{3n}(t) & \cdots & g_{nn}(t) \end{pmatrix}.$$

Assim, $\dot{U}(t) = (G(L(t)) - R(t))U(t) = G(L(t))U(t) - R(t)U(t)$.

Como $L(t) = U(t)\Lambda U(t)^T$ segue, da definição 1.13, que $G(L(t)) = U(t)G(\Lambda)U(t)^T$.

Logo, $\dot{U}(t) = U(t)G(\Lambda) - R(t)U(t)$.

Deste modo,

$$\begin{aligned} \dot{U}(t)^T e_1 &= G(\Lambda)U(t)^T e_1 - U(t)^T R(t)^T e_1 = \\ &= G(\Lambda)\mu(t) - U(t)^T g_{11}(t)e_1 = G(\Lambda)\mu(t) - \mu(t)g_{11}(t). \end{aligned}$$

Agora,

$$\begin{aligned} g_{11}(t) &= e_1^T G(L(t))e_1 = e_1^T U(t)G(\Lambda)U(t)^T e_1 = \\ &= \mu(t)^T G(\Lambda)\mu(t) = \langle G(\Lambda)\mu(t), \mu(t) \rangle. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\dot{\mu}(t) = G(\Lambda)\mu(t) - \langle G(\Lambda)\mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t).$$

□

Corolário 2.36. *A solução da equação diferencial do lema 2.35 é dada por:*

$$\mu_1(L(t)) = \frac{\exp(tG(\Lambda))\mu_1(L(0))}{\|\exp(tG(\Lambda))\mu_1(L(0))\|_2}.$$

Demonstração:

Basta fazer $A = G(\Lambda)$ no lema 2.20.

□

Observação 2.37. *Para resolver o sistema (2.14) com condição inicial L_0 (a priori, matriz de Jacobi com superdiagonal positiva), basta obter as variáveis espectrais correspondentes a L_0 ($\sigma(L_0), \mu_1(L_0)$), calcular sua evolução e recuperar $L(t)$ a partir das novas variáveis inversas, ou seja, uma vez obtidos os autovalores e autovetores de L_0 , resolvemos explicitamente o sistema (2.14).*

Capítulo 3

Método QR versus Fluxos Isospectrais

Iniciamos este capítulo (seção 3.1) apresentando o método QR para calcular os autovalores de uma matriz L dada. Em seguida, expomos algumas propriedades para o caso em que L é uma matriz de Jacobi definida positiva e, então, na seção 3.2, juntamente com os resultados do capítulo 2, concluímos que o método QR é uma avaliação, em tempos inteiros, do fluxo de Toda generalizado obtido por fazer $G(\lambda) = \ln(\lambda)$ no sistema (2.14).

3.1 Método QR

Em 1961, Francis desenvolveu o método QR [9] para calcular autovalores de uma dada matriz. Esse método depende, essencialmente, da fatoração QR da matriz. O método QR é o seguinte:

Fatorize $L = L_0 = Q_0 R_0$ conforme o teorema 1.4. Em seguida, faça $L_1 = R_0 Q_0$. Logo $L_1 = Q_0^T L_0 Q_0$. Evidentemente, L_0 e L_1 são conjugadas e, conseqüentemente, possuem os mesmos autovalores.

Da mesma maneira, faça $L_1 = Q_1 R_1$ e defina $L_2 = R_1 Q_1$. Assim, $L_2 = Q_1^T L_1 Q_1 = Q_1^T Q_0^T L_0 Q_0 Q_1 = (Q_0 Q_1)^T L_0 (Q_0 Q_1)$. Logo L_2 e L_0 são conjugadas e, conseqüentemente, possuem os mesmos autovalores.

Definimos, então, indutivamente, a sequência de matrizes $\{L_k\}$ por:

$$L_k = R_{k-1} Q_{k-1},$$

em que $L_{k-1} = Q_{k-1} R_{k-1}$.

Como $L_k = Q_{k-1}^T L_{k-1} Q_{k-1}$, segue que o algoritmo é isospectral.

Daqui para frente vamos analisar o método QR para uma matriz $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de Jacobi. Vamos supor, também, que L é definida positiva, pois, caso contrário, trasladamos L de tal modo que se torne definida positiva. Essa translação pode ser feita com base no apêndice 1.

Veremos que o método QR para o caso de matrizes de Jacobi definida positiva é uma avaliação, em tempos inteiros, de um fluxo no espaço das matrizes tridiagonais com espectro fixo. Antes, apresentamos alguns resultados importantes sobre o método QR .

Lema 3.1. *Sejam $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tridiagonal e não singular e $L = QR$ a fatoração QR de L , conforme teorema 1.4. Então Q é Hessemberg superior.*

Demonstração:

Seja $L = QR$ a fatoração QR de L (conforme teorema 1.4).

Já vimos que a matriz Q é obtida ao se aplicar o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt às colunas de L , ou seja, se $L = (l_1, l_2, \dots, l_n)$ e $Q = (q_1, q_2, \dots, q_n)$ então $(\forall j = 1 : n)$

$$q_j = \frac{l_j - \sum_{i=1}^{j-1} \langle l_j, q_i \rangle q_i}{\|l_j - \sum_{i=1}^{j-1} \langle l_j, q_i \rangle q_i\|_2}.$$

Como L é tridiagonal, temos que

$$\begin{aligned} l_1 &\in \text{span}\{e_1, e_2\}; \\ l_j &\in \text{span}\{e_{j-1}, e_j, e_{j+1}\} \quad (j = 2 : n - 1); \\ l_n &\in \text{span}\{e_{n-1}, e_n\}. \end{aligned}$$

Assim,

$$q_1 = \frac{l_1}{\|l_1\|} \in \text{span}\{e_1, e_2\} \quad \text{e} \quad q_2 = \frac{l_2 - \langle l_2, q_1 \rangle q_1}{\|l_2 - \langle l_2, q_1 \rangle q_1\|} \in \text{span}\{e_1, e_2, e_3\}.$$

Seguindo este raciocínio, obtemos:

$$\begin{aligned} q_j &\in \text{span}\{e_1, e_2, \dots, e_{j+1}\} \quad (\forall j = 1 : n - 1) \quad \text{e} \\ q_n &\in \text{span}\{e_1, e_2, \dots, e_n\}. \end{aligned}$$

Portanto, Q é Hessemberg superior. □

Lema 3.2. *Seja $L = L_0$ simétrica, tridiagonal e não singular. Então, as iterações do método QR para L_0 são simétricas e tridiagonais.*

Demonstração:

Seja L_k a iteração do método QR para L_0 no passo k . É suficiente demonstrar que se L_k é simétrica e tridiagonal então L_{k+1} é simétrica e tridiagonal.

Pelo método QR, $L_{k+1} = Q_k^T L_k Q_k$. Sabendo-se que L_k é simétrica, segue que L_{k+1} também é simétrica.

Pelo lema 3.1, $L_k = Q_k R_k$ implica que Q_k Hessemberg superior.

Pelo algoritmo QR, $L_{k+1} = R_k Q_k$ e, portanto, L_{k+1} é Hessemberg superior.

Como $L_{k+1} = L_{k+1}^T$ tem-se que L_{k+1} é tridiagonal. □

Lema 3.3. *Seja L_0 simétrica, não singular, tridiagonal e $(L_0)_{j,j+1} > 0$ ($\forall j = 1 : n - 1$). Então $(L_k)_{j,j+1} > 0$ ($\forall j = 1 : n - 1$), em que L_k são as iterações do método QR para L_0 (ou seja, se $L_0 \in \mathbb{T}$ e é não singular então $L_k \in \mathbb{T}$ ($\forall k$)).*

Demonstração:

É suficiente demonstrar que se $(L_k)_{j,j+1} > 0$ ($\forall j = 1 : n - 1$) então

$(L_{k+1})_{j,j+1} > 0$ ($\forall j = 1 : n - 1$).

Seja $L_k = Q_k R_k$ fatoração QR de L_k com $(R_k)_{ii} > 0$ ($\forall i = 1 : n$). Tal fatoração é única (conforme o teorema 1.4). Já vimos no lema 3.1 que Q_k é Hessemberg superior.

Como $(L_k)_{j,j+1} > 0$ ($\forall j = 1 : n - 1$), temos que

$$\begin{aligned} e_j^T L_k e_{j+1} &= e_{j+1}^T L_k e_j = e_{j+1}^T Q_k R_k e_j = \\ &= (0, \dots, 0, (Q_k)_{j+1,j}, \underbrace{(Q_k)_{j+1,j+1}, \dots, (Q_k)_{j+1,n}}_{j+1} \cdot ((R_k)_{1,j}, \dots, (R_k)_{j,j}, \underbrace{0}_{j+1}, \dots, 0))^T = \\ &= (Q_k)_{j+1,j} (R_k)_{jj} > 0. \end{aligned}$$

Como $(R_k)_{jj} > 0$, segue que $(Q_k)_{j+1,j} > 0$.

Pelo algoritmo QR, $L_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T R_k^T$, pois L_{k+1} é simétrica.

Assim,

$$\begin{aligned} e_{j+1}^T L_{k+1} e_j &= e_j^T Q_k^T R_k^T e_{j+1} = \\ &= ((Q_k)_{1,j}, \dots, (Q_k)_{j,j}, \underbrace{(Q_k)_{j+1,j}, 0, \dots, 0}_{j+1} \cdot (0, \dots, 0, \underbrace{(R_k)_{j+1,j+1}, \dots, (R_k)_{j+1,n}}_{j+1}))^T = \\ &= (R_k)_{j+1,j+1} (Q_k)_{j+1,j} > 0, \end{aligned}$$

pois $(R_k)_{j+1,j+1} > 0$.

□

Lema 3.4. *Seja $\{L_k\}$ a sequência das iterações dada pelo algoritmo QR para uma matriz de Jacobi definida positiva L_0 . Seja $L_k = U_k \Lambda U_k^T$ a decomposição espectral de L_k , em que $\mu_k = U_k^T e_1$ possui entradas positivas, e Λ é a matriz dos autovalores em ordem decrescente.*

Então,

$$\mu_k = \frac{\Lambda^k \mu_0}{\|\Lambda^k \mu_0\|_2} \quad (k \geq 1). \quad (3.1)$$

Demonstração:

(Indução sobre k)

Inicialmente vamos mostrar que $\mu_1 = \frac{\Lambda \mu_0}{\|\Lambda \mu_0\|_2}$.

Sabemos, pelo método QR e pelo teorema espectral, que:

$$L_0 = Q_0 R_0 = U_0 \Lambda U_0^T \quad \text{e} \quad L_1 = R_0 Q_0 = U_1 \Lambda U_1^T.$$

Como L_0 e L_1 são matrizes de Jacobi definida positiva (conforme lema 3.3), podemos considerar R_0 com entradas diagonais positivas (conforme teorema 1.4), U_0 e U_1 com a primeira linha positiva e Λ com entradas diagonais em ordem decrescente (conforme lema 2.11).

Podemos escrever

$$U_1 \Lambda U_1^T = L_1 = Q_0^T L_0 Q_0 = Q_0^T U_0 \Lambda U_0^T Q_0 = (Q_0^T U_0) \Lambda (Q_0^T U_0)^T.$$

Assim,

$$U_1 = Q_0^T U_0 I_{\delta_0},$$

em que

$$I_{\delta_0} = \begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Deste modo,

$$\mu_1 = U_1^T e_1 = I_{\delta_0}^T U_0^T Q_0 e_1.$$

Agora, usando o fato que $(R_0)_{11} > 0$ (L_0 é não singular), segue que

$$L_0 e_1 = Q_0 R_0 e_1 = Q_0 (R_0)_{11} e_1,$$

ou seja,

$$Q_0 e_1 = \frac{L_0 e_1}{(R_0)_{11}}.$$

Da fatoração QR , $\|L_0 e_1\|_2 = (R_0)_{11}$.

Portanto, $Q_0 e_1 = \frac{L_0 e_1}{\|L_0 e_1\|_2}$.

Dessa forma,

$$\mu_1 = I_{\delta_0} U_0^T Q_0 e_1 = \frac{I_{\delta_0} U_0^T L_0 e_1}{\|L_0 e_1\|_2} = \frac{I_{\delta_0} U_0^T L_0 e_1}{\|U_0^T L_0 e_1\|_2} = \frac{I_{\delta_0} \Lambda U_0^T e_1}{\|\Lambda U_0^T e_1\|_2} = I_{\delta_0} \frac{\Lambda \mu_0}{\|\Lambda \mu_0\|_2}.$$

Como os vetores μ_1 e $\frac{\Lambda \mu_0}{\|\Lambda \mu_0\|_2}$ possuem entradas positivas e $\mu_1 = I_{\delta_0} \frac{\Lambda \mu_0}{\|\Lambda \mu_0\|_2}$, segue que $I_{\delta_0} = I_n$.

Portanto, $\mu_1 = \frac{\Lambda \mu_0}{\|\Lambda \mu_0\|_2}$.

Agora, supomos por hipótese de indução que $\mu_k = \frac{\Lambda^k \mu_0}{\|\Lambda^k \mu_0\|_2}$.

Novamente, pelo método QR e pelo teorema espectral, temos que:

$$L_k = Q_k R_k = U_k \Lambda U_k^T \quad \text{e} \quad L_{k+1} = R_k Q_k = U_{k+1} \Lambda U_{k+1}^T.$$

Como L_k e L_{k+1} são matrizes de Jacobi definidas positiva (conforme lema 3.3), podemos considerar R_k com entradas diagonais positivas (conforme teorema 1.4), U_k e U_{k+1} com a primeira linha positiva e Λ com entradas diagonais em ordem decrescente (conforme lema 2.11).

Podemos escrever,

$$U_{k+1} \Lambda U_{k+1}^T = L_{k+1} = Q_k^T L_k Q_k = Q_k^T U_k \Lambda U_k^T Q_k = (Q_k^T U_k) \Lambda (Q_k^T U_k)^T.$$

Assim,

$$U_{K+1} = Q_K^T U_K I_{\delta_k},$$

em que

$$I_{\delta_k} = \begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Deste modo,

$$\mu_{k+1} = U_{k+1}^T e_1 = I_{\delta_k} U_k^T Q_k e_1.$$

Agora, usando o fato que $(R_k)_{11} > 0$ (L_k é não singular), segue que

$$L_k e_1 = Q_k R_k e_1 = Q_k (R_k)_{11} e_1,$$

ou seja,

$$Q_k e_1 = \frac{L_k e_1}{(R_k)_{11}}.$$

Da fatoração QR , $\|L_k e_1\|_2 = (R_k)_{11}$.

Portanto, $Q_k e_1 = \frac{L_k e_1}{\|L_k e_1\|_2}$.

Dessa forma,

$$\mu_{k+1} = I_{\delta_k} U_k^T Q_k e_1 = \frac{I_{\delta_k} U_k^T L_k e_1}{\|L_k e_1\|_2} = \frac{I_{\delta_k} U_k^T L_k e_1}{\|U_k^T L_k e_1\|_2} = \frac{I_{\delta_k} \Lambda U_k^T e_1}{\|\Lambda U_k^T e_1\|_2} = I_{\delta_k} \frac{\Lambda \mu_k}{\|\Lambda \mu_k\|_2}.$$

Como os vetores μ_{k+1} e $\frac{\Lambda \mu_k}{\|\Lambda \mu_k\|_2}$ possuem entradas positivas e $\mu_{k+1} = I_{\delta_k} \frac{\Lambda \mu_k}{\|\Lambda \mu_k\|_2}$, segue que $I_{\delta_k} = I_n$.

Logo, por hipótese de indução,

$$\mu_{k+1} = \frac{\Lambda \mu_k}{\|\Lambda \mu_k\|_2} = \frac{\Lambda^k \mu_0}{\|\Lambda^k \mu_0\|_2}.$$

3.2 Método QR e o Fluxo $G(\lambda) = \ln(\lambda)$

A seguir veremos uma conexão entre o fluxo determinado por $G(\lambda) = \ln(\lambda)$ e o método QR. Esta conexão nos fornece uma prova da convergência do método QR para matrizes de Jacobi definida positiva.

Seja $L_0 \in \mathbb{T}$ definida positiva. Seja $\{L_k\}$ a sequência das iterações do método QR para L_0 . Os lemas 3.2 e 3.3 afirmam que $L_k \in \mathbb{T}$ ($\forall k$). Como o método é isospectral, ($\forall k$) L_k é definida positiva.

Pelo lema 3.4, temos que:

$$\mu_1(L_k) = \frac{\Lambda^k \mu_1(L_0)}{\|\Lambda^k \mu_1(L_0)\|_2}. \quad (3.2)$$

Observe que $(\forall k) \|\mu_1(L_k)\|_2 = 1$.

Agora consideremos o sistema,

$$\frac{d}{dt}(L(t)) = B(t)L(t) - L(t)B(t), \quad L(0) = L_0,$$

em que $B(t) = [\ln(L(t))]_+ - [\ln(L(t))]_-$. É evidente que $\ln(L(t))$ está bem definida, pois L_0 é positiva definida e o fluxo $L(t)$ é isospectral.

Pelo lema 2.35, $\mu(t) = \mu_1(L(t))$ satisfaz

$$\dot{\mu}(t) = [\ln(\Lambda)]\mu(t) - \langle [\ln(\Lambda)]\mu(t), \mu(t) \rangle \mu(t), \quad \mu(0) = \mu_1(L(0)).$$

Logo, pelo corolário 2.36,

$$\mu_1(L(t)) = \frac{[\exp(\ln(\Lambda))t]\mu_1(L_0)}{\|[\exp(\ln(\Lambda))t]\mu_1(L_0)\|_2} = \frac{\Lambda^t \mu_1(L_0)}{\|\Lambda^t \mu_1(L_0)\|_2}. \quad (3.3)$$

Deste modo, avaliando $L(t)$ em $t \in \mathbb{N}$, comparando as identidades (3.2)-(3.3) e usando o teorema 2.17, demonstramos o importante resultado:

Teorema 3.5. *Seja $L_0 \in \mathbb{T}$ definida positiva. Então $L_n = L(n)$, em que L_n é a enésima iteração do método QR para L_0 e $L(n)$ é a avaliação em $t = n$ ($n \in \mathbb{N}$) do fluxo determinado pelo sistema (2.14) com $G(\lambda) = \ln(\lambda)$ e $L(0) = L_0$.*

Acabamos de demonstrar que o método QR, no caso de matrizes definida positiva em \mathbb{T} , converge para matrizes diagonais consistindo de autovalores da matriz dada. A proposição seguinte generaliza este resultado para matrizes de Jacobi definida positiva quaisquer, não necessariamente com superdiagonal positiva.

Proposição 3.6. *Sejam T uma matriz de Jacobi e T_+ a matriz obtida por substituir $T_{i,i+1}$ por $|T_{i,i+1}|$ ($\forall i = 1 : n - 1$). Então*

$$T_+ = \Delta T \Delta,$$

em que $\Delta = \text{diag}(\delta_1, \dots, \delta_n)$, $\delta_i = \pm 1$.

Demonstração:

Designamos:

$$\begin{aligned} T_{i,i+1} &= b_i \quad (i = 1 : n - 1) \quad \text{e} \\ T_{ii} &= a_i \quad (i = 1 : n). \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} |b_i| &= e_{i+1}^T T_+ e_i = e_{i+1}^T \Delta T \Delta e_i = \\ &= (0, \dots, 0, \underbrace{\delta_{i+1}}_{i+1}, 0, \dots, 0) \cdot (0, \dots, 0, \delta_i b_{i-1}, \delta_i a_i, \underbrace{\delta_i b_i}_{i+1}, 0, \dots, 0)^T = \\ &= \delta_{i+1} \delta_i b_i \quad (i = 1 : n - 1). \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} |b_1| &= \delta_2 \delta_1 b_1; \\ |b_2| &= \delta_3 \delta_2 b_2; \\ &\vdots \\ |b_{n-1}| &= \delta_n \delta_{n-1} b_{n-1}. \end{aligned}$$

Agora, fixamos um sinal para δ_1 e calibramos os demais sinais $(\delta_2, \dots, \delta_n)$ em função dos sinais dos b'_k s $(k = 2 : n - 1)$.

□

Capítulo 4

Considerações Numéricas sobre o Fluxo de Toda

Neste capítulo apresentamos um resultado sobre a velocidade de convergência do fluxo de Toda. Através dele, vemos que a velocidade de convergência do fluxo de Toda é exponencial e depende da menor diferença entre os autovalores da condição inicial $L(0)$. Este resultado é abordado em [3], porém a demonstração é superficial. Em seguida, calculamos numericamente os autovalores de uma dada matriz via resolução numérica da equação de Toda.

Proposição 4.1. *Considere a equação de Toda*

$$\begin{cases} \dot{a}_k(t) = 2b_k^2(t) - 2b_{k-1}^2(t) & (k = 1 : n), \\ \dot{b}_k(t) = b_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)) & (k = 1 : n - 1), \end{cases} \quad (4.1)$$

em que $b_0(t) = b_n(t) \equiv 0$ ($\forall t$) e $b_k(0) > 0$ ($k = 1 : n - 1$) (ou, equivalentemente, L_0 é de Jacobi no sistema (2.5)). Então, existe uma constante C (que depende de L_0) e um tempo T tal que, se $t > T$,

$$\begin{aligned} |a_k(t) - a_k(\infty)| &< C \exp(2tm) & (k = 1 : n) & \text{ e} \\ |b_k(t)| &< C \exp(tm) & (k = 1 : n - 1), \end{aligned}$$

em que $m = -\min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1}) = \max_{k=1:n-1} (\lambda_{k+1} - \lambda_k)$.

Demonstração:

Já sabemos, pelo teorema do comportamento assintótico (teorema 2.10), que

$$\begin{aligned} b_k(t) &\rightarrow 0 \quad \text{quando } t \rightarrow \infty \quad (k = 1 : n-1) \quad \text{e} \\ a_k(t) &\rightarrow \lambda_k \quad \text{quando } t \rightarrow \infty \quad (k = 1 : n). \end{aligned}$$

Em (4.1), façamos $c_k(t) = 2b_k^2(t)$ ($k = 1 : n-1$).

Assim,

$$\begin{aligned} \dot{c}_k(t) &= 4b_k(t)\dot{b}_k(t) = 4b_k^2(t)[a_{k+1}(t) - a_k(t)] = \\ &= 2c_k(t)[a_{k+1}(t) - a_k(t)] \quad (k = 1 : n-1) \quad \text{e} \end{aligned}$$

$$\dot{a}_k(t) = [c_k(t) - c_{k-1}(t)] \quad (k = 1 : n),$$

em que $c_0(t) = c_n(t) \equiv 0$ ($\forall t$).

Evidentemente, $c_k(t) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$ ($k = 1 : n-1$).

Além disso, ($\forall t$) $c_k(t) \neq 0$ ($k = 1 : n-1$) (ver lema 2.6).

Como $\frac{d}{dt}[\ln(c_k(t))] = \frac{\dot{c}_k(t)}{c_k(t)}$, temos:

$$\frac{d}{dt}[a_k(t)] = [c_k(t) - c_{k-1}(t)] \quad (k = 1 : n) \quad \text{e}$$

$$\frac{d}{dt}[\ln(c_k(t))] = 2[a_{k+1}(t) - a_k(t)] \quad (k = 1 : n-1).$$

Integrando as identidades acima, obtemos:

$$\begin{aligned} \int_t^\infty \frac{d}{ds}[a_k(s)]ds &= \int_t^\infty [c_k(s) - c_{k-1}(s)]ds \quad (k = 1 : n) \Rightarrow \\ \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} [a_k(t)] &= a_k(t) + \int_t^\infty [c_k(s) - c_{k-1}(s)]ds \quad (k = 1 : n) \Rightarrow \\ \Rightarrow \lambda_k &= a_k(t) + \int_t^\infty [c_k(s) - c_{k-1}(s)]ds \quad (k = 1 : n), \end{aligned}$$

ou seja,

$$\lambda_k = a_k(t) + \int_t^\infty [c_k(s) - c_{k-1}(s)]ds \quad (k = 1 : n) \quad (4.2)$$

e

$$\begin{aligned}
\int_0^t \frac{d}{ds} [\ln(c_k(s))] ds &= 2 \int_0^t [a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \quad (k = 1 : n-1) \Rightarrow \\
\Rightarrow \ln(c_k(t)) - \ln(c_k(0)) &= 2 \int_0^t [a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \quad (k = 1 : n-1) \Rightarrow \\
\Rightarrow c_k(t) &= c_k(0) \exp \left[\int_0^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right] \quad (k = 1 : n-1),
\end{aligned}$$

ou seja,

$$c_k(t) = c_k(0) \exp \left[\int_0^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right] \quad (k = 1 : n-1). \quad (4.3)$$

Seja $0 < \epsilon < \frac{1}{2} \left[\min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1}) \right]$, fixo. Observe que $\min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1}) > 0$, pois, pelo lema (2.9), $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$.

Pelo teorema do comportamento assintótico, existe $T > 0$ tal que, se $t > T$,

$$|a_k(t) - \lambda_k| < \epsilon \quad (k = 1 : n) \quad (4.4)$$

e

$$0 < c_k(t) < \epsilon \quad (k = 1 : n-1). \quad (4.5)$$

Portanto, se $t > T$, temos:

$$\begin{aligned}
0 < c_k(t) &= c_k(0) \exp \left[\int_0^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right] = \\
&= c_k(0) \exp \left[\int_0^T 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds + \int_T^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right] = \\
&= c_k(0) \underbrace{\left[\exp \int_0^T 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right]}_{\text{cte positiva}} \exp \int_T^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds.
\end{aligned}$$

Agora,

$$\begin{aligned}
& \exp \int_T^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)]ds = \\
& = \exp \int_T^t 2 \underbrace{[a_{k+1}(s) - \lambda_{k+1} + \lambda_{k+1} - \lambda_k + \lambda_k - a_k(s)]}_{< \epsilon} ds < \\
& < \exp \int_T^t 2(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon)ds = \exp 2(t - T)(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon) = \\
& = \underbrace{\exp(-2T)(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon)}_{\text{cte positiva}} \exp 2t(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon).
\end{aligned}$$

Logo ($\forall t > T$),

$$\begin{aligned}
c_k(t) & < A_k^{(1)} \exp 2t(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon) \leq \\
& \leq \underbrace{\left(\max_{k=1:n-1} A_k^{(1)} \right)}_{A^{(1)} > 0} \exp 2t(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon).
\end{aligned}$$

Assim ($\forall t > T$),

$$0 < c_k(t) < A^{(1)} \exp 2t(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon) \quad (k = 1 : n - 1). \quad (4.6)$$

Além disso, de (4.2), temos ($\forall t > T$) ($k = 1 : n$),

$$\begin{aligned}
|\lambda_k - a_k(t)| & = \left| \int_t^\infty [c_k(s) - c_{k-1}(s)]ds \right| \leq \int_t^\infty [c_k(s) + c_{k-1}(s)]ds \leq \\
& \leq \int_t^\infty A^{(1)} \exp 2s(\lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon)ds + \int_t^\infty A^{(1)} \exp 2s(\lambda_k - \lambda_{k-1} + 2\epsilon)ds,
\end{aligned}$$

em que $\lambda_0 = \lambda_{n+1} = 0$.

Agora,

$$\begin{aligned}
- \min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1}) & = \max_{k=1:n-1} (\lambda_{k+1} - \lambda_k) = m \Rightarrow \\
\Rightarrow \lambda_{k+1} - \lambda_k + 2\epsilon & \leq m + 2\epsilon \quad (k = 1 : n - 1).
\end{aligned}$$

Ademais, pela escolha de ϵ , temos

$$2\epsilon < \min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1}) = - \max_{k=1:n-1} (\lambda_{k+1} - \lambda_k) = -m,$$

ou seja,

$$m + 2\epsilon < 0.$$

Portanto $(\forall t > T) \quad (k = 1 : n)$,

$$\begin{aligned} |\lambda_k - a_k(t)| &< \int_t^\infty 2A^{(1)} \exp 2s(m + 2\epsilon) ds = \\ &= \frac{A^{(1)}}{m+2\epsilon} \exp 2s(m + 2\epsilon) \Big|_t^\infty = \underbrace{\frac{A^{(1)}}{-(m + 2\epsilon)}}_{A^{(2)} > 0} \exp 2t(m + 2\epsilon), \end{aligned}$$

ou seja, $(\forall t > T) \quad (k = 1 : n)$

$$|\lambda_k - a_k(t)| < A^{(2)} \exp 2t(m + 2\epsilon). \quad (4.7)$$

Assim, de (4.6)-(4.7), temos $(\forall t > T)$

$$\begin{cases} c_k(t) < A^{(3)} \exp 2t(m + 2\epsilon) & (k = 1 : n - 1) \text{ e} \\ |\lambda_k - a_k(t)| < A^{(3)} \exp 2t(m + 2\epsilon) & (k = 1 : n), \end{cases} \quad (4.8)$$

em que $A^{(3)} = \max\{A^{(1)}, A^{(2)}\} > 0$.

Agora, reestimando $c_k(t) \quad (k = 1 : n - 1)$, obtemos $(\forall t > T)$

$$\begin{aligned} c_k(t) &= c_k(0) \exp \left(\int_0^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right) = \\ &= \underbrace{c_k(0) \exp \left(\int_0^T 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right)}_{\text{cte positiva}} \exp \left(\int_T^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)] ds \right). \end{aligned}$$

Mas,

$$\begin{aligned}
& \exp\left(\int_T^t 2[a_{k+1}(s) - a_k(s)]ds\right) = \\
& = \exp\left(\int_T^t 2[\lambda_{k+1} - \lambda_k]ds\right) \exp\left(\int_T^t 2[a_{k+1}(s) - \lambda_{k+1} + \lambda_k - a_k(s)]ds\right) < \\
& < \exp[2(t - T)m] \exp\left(\int_T^t 4A^{(3)} \exp 2s(m + 2\epsilon)ds\right) < \\
& < \underbrace{\exp(-2Tm)}_{\text{cte positiva}} \exp 2tm \left(\int_0^\infty 4A^{(3)} \exp 2s(m + 2\epsilon)ds\right) = \\
& = \exp(-2Tm) \exp(2tm) \exp\left(\frac{2A^{(3)}}{m+2\epsilon} \exp 2s(m + 2\epsilon)\right) \Big|_0^\infty = \\
& = \underbrace{\exp(-2Tm) \exp\left(\frac{2A^{(3)}}{-(m + 2\epsilon)}\right)}_{\text{cte positiva}} \exp(2tm).
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
c_k(t) & \leq A^{(4)} \exp(2tm) \quad (k = 1 : n - 1) \Rightarrow \\
\Rightarrow b_k(t) & \leq \left(\frac{A^{(4)}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(tm) \quad (k = 1 : n - 1). \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Finalmente ($\forall t > T$),

$$\begin{aligned}
|\lambda_k - a_k(t)| & \leq \int_t^\infty |c_k(s) - c_{k-1}(s)|ds \leq \\
& \leq \int_t^\infty [c_k(s) + c_{k-1}(s)]ds < \int_t^\infty 2A^{(4)} \exp(2sm)ds = \\
& = \frac{A^{(4)}}{m} (\exp 2sm) \Big|_t^\infty = \underbrace{\frac{A^{(4)}}{-m}}_{\text{cte positiva}} \exp(2tm) \Rightarrow \\
\Rightarrow |\lambda_k - a_k(t)| & < \frac{A^{(4)}}{-m} \exp(2tm) \quad (k = 1 : n). \tag{4.10}
\end{aligned}$$

De (4.9)-(4.10), segue que ($\forall t > T$),

$$|a_k(t) - \lambda_k| < C \exp(2tm) \quad (k = 1 : n) \quad e$$

$$|b_k(t)| < C \exp(tm) \quad (k = 1 : n - 1).$$

em que $C = \max \left\{ \left(\frac{A^{(4)}}{2} \right)^{\frac{1}{2}}, \left(\frac{A^{(4)}}{-m} \right) \right\} > 0$ e $m = - \min_{k=1:n-1} (\lambda_k - \lambda_{k+1})$.

□

Observação 4.2. *Considere o fluxo determinado pelo sistema (2.14) com $G(\lambda)$ injetiva em um domínio aberto que contém o espectro de L_0 . Em [3], afirma-se que a velocidade de convergência deste fluxo é exponencial e depende da menor diferença entre os $G(\lambda_k)$. Assim, no caso do método QR (onde $G(\lambda) = \ln(\lambda)$), segue que:*

$$\min_{k=1:n-1} [G(\lambda_k) - G(\lambda_{k+1})] = \min_{k=1:n-1} [\ln(\lambda_k) - \ln(\lambda_{k+1})] =$$

$$= \min_{k=1:n-1} \ln \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_{k+1}} \right) = \ln \min_{k=1:n-1} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_{k+1}} \right),$$

ou seja, a velocidade de convergência do método QR depende do menor quociente $\frac{\lambda_k}{\lambda_{k+1}}$ ($k = 1 : n - 1$).

A seguir apresentamos um exemplo cujo interesse é apenas comprovar os resultados obtidos nos capítulos anteriores. Para tanto, resolvemos numericamente a equação de Toda considerando $L_0 = L$, uma matriz de ordem n , tridiagonal e simétrica, dada por:

$$L_{kk} = 2 \quad (k = 1 : n - 1);$$

$$L_{nn} = 1;$$

$$L_{k,k+1} = 1 \quad (k = 1 : n - 1).$$

Sabemos, a priori, que os autovalores de L são dados por:

$$\lambda_k = 4 \cos^2 \left(\frac{k\pi}{2n+1} \right) \quad (k = 1 : n).$$

Observe que, a medida que n cresce, os autovalores tornam-se cada vez mais próximos. Este fato deve beneficiar a convergência do método QR, conforme

observação 4.2, e tornar a velocidade de convergência da resolução numérica da equação de Toda lenta, conforme teorema 4.1. É o que vemos a seguir.

Em vez de resolver numericamente a equação de Toda (sistema (2.4)), resolvemos a equação equivalente:

$$\begin{cases} \dot{a}_k(t) = c_k(t) - c_{k-1}(t) & (k = 1 : n), \\ \dot{c}_k(t) = 2c_k(t)(a_{k+1}(t) - a_k(t)) & (k = 1 : n - 1), \end{cases}$$

em que $c_k(t) = 2b_k^2(t)$ ($k = 1 : n - 1$) e $(\forall t) c_0(t) = c_n(t) \equiv 0$.

As tabelas (4.1)-(4.2) apresentam os resultados obtidos via método QR e via resolução numérica da equação de Toda (ver anexos) para o cálculo dos autovalores de L .

Tabela 4.1: Método QR

Ordem da matriz	tempo (segundos)	erro absoluto	flops
3	0.11	10^{-16}	126
10	0.11	10^{-15}	1.655
50	0.16	10^{-14}	70.687
100	0.33	10^{-14}	444.144
300	1.07	10^{-14}	9.950.168

Tabela 4.2: Resolução numérica da equação de Toda

Ordem da matriz	tempo (segundos)	erro absoluto	flops
3	0.22	10^{-5}	23.208
10	0.38	10^{-4}	123.276
50	1.98	10^{-4}	1.070.156
100	7.03	10^{-3}	3.465.486
300	79.97	10^{-3}	27.481.385

Os resultados acima mostram que, para este exemplo, o método QR se mostra mais eficiente que resolução numérica da equação de Toda.

Todos os cálculos foram feitos em um Pentium II (333MHz) usando o sistema interativo MATLAB. No cálculo dos autovalores, via método QR, utilizamos a função QR do MATLAB (a qual usa a rotina RATQR do pacote EISPACK). Para resolver a equação de Toda, utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem do MATLAB (ODE45) com critério de parada $\max_{k=1:n-1} (L_{k,k+1}(t)) < 10^{-5}$.

Os gráficos seguintes ilustram como o máximo dos $b_k(t)$ se comportam durante a evolução.

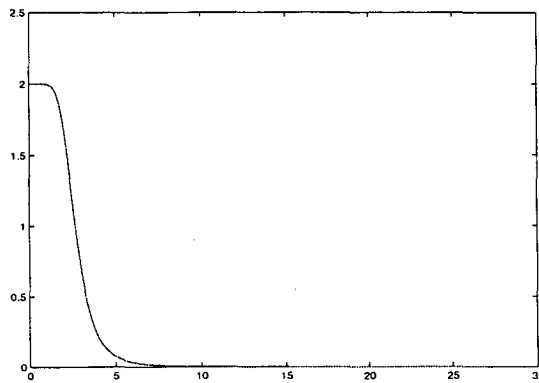


Figura 4.1: Caso $n=10$

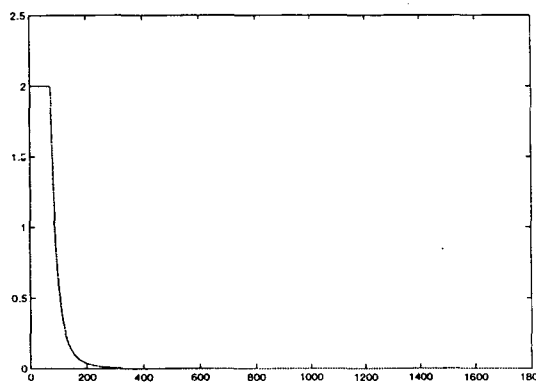


Figura 4.2: Caso $n=300$

Como vimos anteriormente, a resolução numérica da equação de Toda mostrou-se ineficiente quando comparada com o método QR . Evidentemente, poderíamos ter implementado outros métodos a partir de diferentes escolhas de funções $G(\lambda)$. Porém, os resultados que obteríamos seriam ainda piores (conforme [4]). Recentemente, A. Iserles, A. Zanna e M. Calvo publicaram um artigo [1], sobre soluções numéricas de fluxos isospectrais. Neste artigo eles afirmam que os métodos de Runge-Kutta clássicos não são adequados para estes fluxos e introduzem um método alternativo para resolver os fluxos.

Conclusões

O resultado mais significativo deste trabalho é que os valores L_k obtidos pelo método QR , para uma matriz de Jacobi definida positiva, são interpolados por um fluxo de Toda generalizado. Outra maneira de pensar é que o método QR resolve, em tempos inteiros, uma equação diferencial não linear muito complicada.

Os resultados obtidos na §2 do capítulo 2, para o fluxo de Toda generalizado, ainda podem ser estendidos para sistemas mais gerais. Se considerarmos o sistema (2.14) com $L(t)$ qualquer e L_0 diagonalizável, Nanda [14] demonstrou que a solução do sistema converge para uma matriz triangular superior, cujos elementos da diagonal principal são exatamente os autovalores de L_0 .

Vale salientar que os resultados apresentados neste trabalho encontram-se nos artigos [4], [14], [3].

Anexos

Rotina novotodal.m

```
%%% Implementação do Fluxo de Toda %%%  
  
flops(0)  
clear  
global n  
  
n = input('ordem da matriz: ');  
t1 = input('tempo final: ');  
  
%%% Matriz teste L(0) %%%  
%%% Novas condições iniciais %%%  
  
for k = 1:n-1  
    diag(k) = 2;  
    ddiag(k) = 2;  
end  
diag(n) = 1;  
  
tic %(inicia a cronometragem para a execucao do programa)  
  
%%% Resolução da Equação de Toda com condição inicial L(0) %%%  
  
to = 0;  
tf = t1;  
yo = [diag ddiag];  
  
while abs(max(yo(n+1:2*n-1))) > (1.0e-005)/2  
  
options = odeset('RelTol',1e-3,'AbsTol',1e-6);  
[T,Y]=ode45('fluxonovo1',[to tf],yo,options);  
  
yo = [Y(size(Y,1),1:n) Y(size(Y,1),n+1:2*n-1)];
```

```

to = to + t1;
tf = tf + t1;

end

diag_a = Y(size(Y,1),1:n);
diag_s = sort(diag_a);
%ddiag_c = Y(size(Y,1),n+1:2*n-1);

%%% Autovalores exatos de L(0) %%%

for k = 1:n
    spec(k) = 4*(cos((k*pi)/(2*n+1)))^2;
end
spec = sort(spec); % ordenação do vetor spec (decrecente)

%%% Cálculo aproximado do erro %%%

for k=1:n
erro(k) = abs(diag_s(k)-spec(k));
end

erro_max = max(erro);

f=flops;

%%% Comportamento dos c(k)'s %%%

for k = 1:size(T,1)
    maxi(k) = max(Y(k,n+1:2*n-1));
end

plot(T,maxi)

%%% Outputs %%%

```



```
disp('Espectro da matriz inicial via ODE45:');
disp(diag_a)

disp('Erro máximo:');
disp(erro_max)

tempo = toc;    %(finaliza a cronometragem para a execução do programa)
disp('Tempo para execução do programa:');
disp(tempo)
disp('Flops number:');
disp(f)
```

Rotina fluxonovo1.m

```
%%% Arquivo .m para rotina novotoda1.m %%%  
%%% a(1) = y(1), ..., a(n) = y(n) %%%  
%%% c(1) = c(y+1), ..., c(n-1) = y(2n-1) %%%
```

```
function [fluxo] = fluxonovo1(x,y);
```

```
global n
```

```
fluxo(1,1) = y(n+1);
```

```
for k=2:n-1
```

```
    fluxo(k,1) = y(n+k) - y(n+k-1);
```

```
end
```

```
fluxo(n,1) = -y(2*n-1);
```

```
for k=1:n-1
```

```
    fluxo(n+k,1) = 2*y(n+k)*(y(k+1) - y(k));
```

```
end
```

Apêndice 1

Teorema do Círculo de Gerschgorin

Seja $A = (a_{ij})$ uma matriz $n \times n$, real ou complexa, e seja

$$r_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad (i = 1 : n).$$

(Isto é, r_i é a soma dos elementos fora da diagonal da i -ésima coluna de A .) Sejam, também,

$$\Lambda_i = \{z \in \mathbb{C} ; |z - a_{ii}| < r_i\}, \quad (i = 1 : n),$$

discos no plano complexo centrados em a_{ii} e com raio r_i . Então, todos os autovalores de A pertencem a união dos discos $\Lambda_1, \dots, \Lambda_n$.

Demonstração:

Seja λ um autovalor de A e $v = \{v_1, \dots, v_n\}$ um autovetor correspondente. Por definição, $Av = \lambda v$.

Então,

$$(\lambda - a_{ii})v_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}v_j, \quad (i = 1 : n).$$

Seja $v_k = \max_{i=1:n} |v_i|$. Então,

$$|\lambda - a_{kk}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n |a_{kj}| \frac{|v_j|}{|v_k|} \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n |a_{kj}|.$$

Desta maneira, λ está no disco centrado em a_{kk} e, portanto, na união de todos os discos.

□

Referências Bibliográficas

- [1] A. Iserles; A. Zanna; M. P. Calvo. **Numerical solution of isospectral flows**. Mathematics of Computation, American Mathematical Society, (66)1997, pp. 1461-1486.
- [2] B. N. Parlett. **The symmetric eigenvalue problem**. SIAM, Philadelphia, 1998.
- [3] C. Tomei. **Fluxos de matrizes**. 15. Colóquio Brasileiro de Matemática, Poços de Caldas, 1985.
- [4] C. Tomei; P. Deift; T. Nanda. **Ordinary differential equations and the symmetric eigenvalue problem**. SIAM J. of Num. Anal., 20(1983), pp. 1-22.
- [5] D. G. Figueiredo; A. F. Neves. **Equações diferenciais aplicadas**. Coleção Matemática Universitária, Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, Rio de Janeiro, 1997.
- [6] E. L. Lima. **Curso de análise**. Vol. 1, 7st ed., Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Projeto Euclides, CNPq, Rio de Janeiro, 1992.
- [7] G. H. Golub; C. F. Van Loan. **Matrix Computations**. 3rd ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.
- [8] H. Flaschka. **The Toda lattice II. Existence of integrals**. Physical Review B, 9(1974), pp. 1924-1925.
- [9] J. H. Wilkinson. **The algebraic eigenvalue problem**. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [10] J. Sotomayor. **Lições de equações diferenciais ordinárias**. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Projeto Euclides, CNPq, Rio de Janeiro, 1979.

- [11] M. Toda. **Wave propagation in anharmonic lattices**. Journal of the Physical Society of Japan, 23(1967), pp. 501-506
- [12] R. A. Horn; C. R. Johnson. **Matrix analysis**. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [13] R. Bellman. **Introduction to Matrix Analysis**. 3rd ed., SIAM, Philadelphia, 1997.
- [14] T. Nanda. **Differential equations and the QR algorithm** . SIAM, J. of Num. Anal., 22(1985), pp. 310-321.