

LEONARDO MORETO ELIAS

MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES QUADRÁTICAS

CURITIBA

DEZEMBRO, 2010

LEONARDO MORETO ELIAS

MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES QUADRÁTICAS

Monografia apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciado em Matemática, pelo Departamento de Matemática, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.

Orientadora: Elizabeth Wegner Karas

Co-Orientador: Ademir Alves Ribeiro

CURITIBA

DEZEMBRO, 2010

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida. Agradeço também a minha família, que sempre me apoiou nas minhas decisões. Agradeço aos meus amigos, em especial aos colegas de turma Alana, Ednei, Hannah e Izabele, por sempre estarem comigo nas dificuldades encontradas. Agradeço aos meus professores pelos conhecimentos que me transmitiram. Agradeço aos professores Ademir e Lucas pelas sugestões e conselhos relacionados a este trabalho. Agradeço aos colegas de IC: Flavia, Karla, Tuanny e Wagner, pelo auxílio em toda a pesquisa e agradeço especialmente à professora Elizabeth, que me orientou e me ajudou não apenas no trabalho, mas em diversas lições que levarei pela vida inteira.

Sumário

Lista de Figuras	iv
Resumo	vi
1 INTRODUÇÃO	1
2 DIAGONALIZAÇÃO DE MATRIZES	3
2.1 Propriedades da diagonalização de matrizes	3
2.1.1 Autovalores e autovetores	3
2.1.2 Matrizes semelhantes	4
2.1.3 Matrizes simétricas	8
2.2 Matriz definida positiva	16
2.2.1 Uma aplicação ao cálculo	17
2.2.2 Matriz definida positiva	18
2.2.3 Algumas propriedades	20
2.3 Fatoração QR	23
2.3.1 Processo de Gram-Schmidt	23
2.3.2 Fatoração QR	26
3 MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES QUADRÁTICAS	29

3.1	Funções quadráticas	29
3.2	Método de Cauchy	36
3.2.1	Busca Exata	37
3.2.2	Passo dado pelo inverso dos autovalores da Hessiana	38
4	TESTES COMPUTACIONAIS.....	44
4.1	Programação dos métodos	44
4.1.1	Programação da matriz definida positiva.....	44
4.1.2	Programação do Método	45
4.2	Comparação dos algoritmos	50
4.2.1	Teste inicial	50
4.2.2	Perfil de desempenho	51
5	CONCLUSÃO	55
	Referências.....	57

Lista de Figuras

Figura 1	Projeção ortogonal	23
Figura 2	Curvas de nível	31
Figura 3	Gráfico	31
Figura 4	Curvas de nível	32
Figura 5	Gráfico	33
Figura 6	Curvas de nível	33
Figura 7	Gráfico	34
Figura 8	Curvas de nível	35
Figura 9	Gráfico	35
Figura 10	Trajetória do algoritmo de Cauchy	38

Figura 11	Trajétória do algoritmo (1º caso)	42
Figura 12	Trajétória do algoritmo (2º caso)	43
Figura 13	Norma do gradiente para busca linear exata	50
Figura 14	Comparação dos algoritmos	51
Figura 15	Perfil de desempenho	53

Resumo

Em Otimização, existem vários métodos para minimizar funções reais de várias variáveis. Um método clássico é o de Cauchy que usa em cada iteração a direção de máxima descida, ou seja, a direção oposta ao gradiente. Ao longo de cada direção calcula-se o comprimento do passo. Normalmente este comprimento é obtido por uma minimização unidirecional que pode ser exata (tipo Seção Áurea) ou inexata (tipo Armijo). Neste trabalho serão consideradas funções quadráticas convexas em \mathbb{R}^n e toma-se como comprimento do passo o inverso de um autovalor da Hessiana da quadrática. Independente da ordem em que sejam escolhidos os autovalores e do ponto inicial, prova-se que o método converge em no máximo n passos. No desenvolvimento do método, para simplificar a notação, trabalhou-se com a Hessiana dada na forma diagonal. Foram apresentados resultados numéricos comparando o método proposto com diferentes ordenações dos autovalores da Hessiana e com o método de Cauchy com busca linear exata.

Palavras-chave: Otimização irrestrita; Método de Cauchy; Funções quadráticas.

1 INTRODUÇÃO

O trabalho trata de um importante problema da área de Otimização irrestrita: minimizar funções. Em outras palavras, encontrar um elemento do domínio que atinge o menor valor da função. No entanto, será trabalhado apenas com funções quadráticas convexas.

Para resolver este problema, são utilizados métodos iterativos que partem de um ponto inicial arbitrário. Será apresentado o método clássico de Cauchy com busca linear exata (SANTOS; XAVIER, 2005) e uma proposta nova, que utiliza o método de Cauchy, mas, no entanto, o tamanho do passo é dado pelo inverso dos autovalores da Hessiana.

Para analisar as propriedades desses métodos e compará-los, será utilizado um forte teorema sobre diagonalização de matrizes simétricas (HILL; KOLMAN, 2006) e alguns recursos de Geometria Analítica.

Foram realizados testes computacionais com o objetivo de verificar a influência que a variação da ordem que os autovalores são escolhidos na expressão do algoritmo tem sobre o seu desempenho, utilizando uma ferramenta chamada Perfil de desempenho (DOLAN; MORÉ, 2002).

O trabalho se organiza da seguinte forma: inicialmente são apresentados tópicos de Álgebra Linear que serão utilizados nos próximos capítulos. É feita uma revisão a respeito de diagonalização de matrizes, das principais propriedades de diagonalização de matrizes simétricas, de alguns teoremas de matriz definida positiva e da fatoração QR .

Já no terceiro capítulo são apresentadas as funções quadráticas e sua relação com o sinal da Hessiana. Após, será visto o método de Cauchy com busca linear exata e com o passo tomado pelo inverso dos autovalores da Hessiana. Serão analisadas as propriedades desses métodos, mas antes, utilizando teoremas do capítulo 2, será realizado uma troca de variável com a finalidade de simplificar a notação.

No quarto capítulo serão apresentados testes computacionais utilizando quatro escolhas de variações na ordem dos autovalores e o método de Cauchy com busca linear exata. Utilizando gráficos de "perfil de desempenho", estes algoritmos serão comparados.

Enfim, o trabalho apresenta resultados relevantes para a área e conclusões que tornam o método proposto destacável em relação aos métodos tradicionais, apesar da sua complexidade algorítmica

2 DIAGONALIZAÇÃO DE MATRIZES

Neste capítulo revisaremos alguns tópicos de Álgebra Linear. Apresentamos propriedades de diagonalização de matrizes e análise da diagonalização de matrizes simétricas. Após, tratamos das matrizes positivas definidas e algumas de suas características. Por fim, abordamos a fatoração QR . As principais referências são (HILL; KOLMAN, 2006) e (LEON, 1999).

2.1 Propriedades da diagonalização de matrizes

2.1.1 Autovalores e autovetores

Definição 2.1 *Seja $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ uma matriz de ordem n com elementos reais. Um escalar λ é um autovalor ou valor característico de A se existe um vetor não nulo v tal que*

$$Av = \lambda v.$$

O vetor v é um autovetor ou vetor característico de A associado a λ .

Exemplo 2.2 *Considere*

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \text{ e } v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Como

$$Av = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = 4v,$$

então $\lambda = 4$ é um autovalor de A e $v = (2, 1)^T$ é um autovetor associado a λ .

De fato, qualquer múltiplo não-nulo de v é um autovetor, já que

$$A(\alpha v) = \alpha Av,$$

pois α é escalar. Como o produto de números reais é comutativo e produto de escalar por vetor é associativo, então temos que

$$\alpha Av = \alpha \lambda v = \lambda(\alpha v).$$

Definição 2.3 O polinômio característico de uma matriz A é um polinômio de grau n na variável λ obtido pela expansão do determinante

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I).$$

Proposição 2.4 Os autovalores de A são justamente as raízes do seu polinômio característico.

Demonstração 1 A equação $Av = \lambda v$ pode ser colocada na forma

$$(A - \lambda I)v = 0. \tag{2.1}$$

Logo, λ é um autovalor de A se e somente se (2.1) tem uma solução não-trivial. A equação terá solução não-trivial se e somente se $A - \lambda I$ é singular ou, equivalentemente, se

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Ou seja, $p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$. Dessa forma, λ é um autovalor de A se, e somente se λ for raiz do seu polinômio característico. \square

2.1.2 Matrizes semelhantes

Definição 2.5 Uma matriz D é dita semelhante a uma matriz A se existe uma matriz invertível P tal que

$$D = P^{-1}AP.$$

Dizemos que a matriz A é *diagonalizável* se D for uma matriz diagonal. Neste caso, dizemos também que A pode ser diagonalizada.

Exemplo 2.6 *Considere*

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

e

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

então:

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 2 \\ 3 & -1 & -2 \\ 2 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & -1 & -2 \\ 2 & 0 & -2 \\ 2 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

portanto A é semelhante a uma matriz diagonal e assim A é diagonalizável.

Os autovalores de uma matriz diagonal são justamente os elementos que ocupam sua diagonal. No exemplo anterior, os autovalores da matriz semelhante a A são 0 e 1. O próximo teorema apresenta uma relação entre os autovalores de matrizes semelhantes.

Teorema 2.7 *Matrizes semelhantes têm os mesmos autovalores.*

Demonstração 2 *Sejam A e B semelhantes. Então $B = P^{-1}AP$, para alguma matriz P invertível. Vamos provar que A e B têm os mesmos polinômios característicos, $p_A(\lambda)$ e $p_B(\lambda)$, respectivamente. Temos, por definição, que:*

$$p_B(\lambda) = \det(\lambda I_n - B) = \det(\lambda I_n - P^{-1}AP)$$

$$= \det(P^{-1}\lambda I_n P - P^{-1}AP),$$

pois $P^{-1}P = I$ e multiplicação de matriz pela matriz identidade é comutativa, assim como multiplicação de matriz por escalar. Tirando P^{-1} em evidência à esquerda e P em evidência à direita, temos:

$$\det(P^{-1}\lambda I_n P - P^{-1}AP) = \det(P^{-1}(\lambda I_n - A)P).$$

Como determinante do produto é o produto dos determinantes e produto de números reais é comutativo, então

$$\det(P^{-1}(\lambda I_n - A)P) = \det(P^{-1})\det(P)\det(\lambda I_n - A).$$

Por fim, como o determinante da inversa é o inverso do determinante, temos

$$\det(P^{-1})\det(P)\det(\lambda I_n - A) = \det(\lambda I_n - A) = p_A(\lambda).$$

Como $p_A(\lambda) = p_B(\lambda)$, então A e B têm os mesmos autovalores. □

Assim, de acordo com o teorema, os autovalores da matriz A do exemplo também são 0 e 1.

Nem todas as matrizes são diagonalizáveis. O próximo teorema nos dá uma condição suficiente para verificar se a matriz pode ser diagonalizada.

Teorema 2.8 *Uma matriz $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ é diagonalizável se e somente se A tiver n autovetores linearmente independentes.*

Demonstração 3 *Seja A semelhante a uma matriz diagonal D , ou seja, existe uma matriz P invertível tal que*

$$D = P^{-1}AP.$$

Multiplicando ambos os membros da igualdade por P à esquerda, temos

$$AP = PD. \quad (2.2)$$

Seja

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix},$$

v_j ($j = 1, 2, \dots, n$) a j -ésima coluna de P e considere

$$A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix},$$

onde a_j é a j -ésima linha da matriz A . Observe que

$$AP = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Av_1 & Av_2 & \cdots & Av_n \end{bmatrix}.$$

Por outro lado,

$$PD = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 v_2 & \cdots & \lambda_n v_n \end{bmatrix}.$$

Assim, de (2.2)

$$Av_j = \lambda_j v_j. \quad (2.3)$$

Como P é uma matriz invertível, suas colunas são linearmente independentes

e, portanto, são todas diferentes de zero. Então, λ_j é um autovalor de A e v_j é um autovetor correspondente.

Reciprocamente, considere $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ como n autovalores de A e que os autovetores v_1, v_2, \dots, v_n correspondentes são linearmente independentes. Seja

$$P = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix}$$

a matriz cuja j -ésima coluna é v_j . Como as colunas de P são linearmente independentes, então P é invertível.

De (2.3) obtemos (2.2), que implica que A é diagonalizável. \square

Dessa forma, no processo de diagonalização de uma matriz $A_{n \times n}(\mathbb{R})$, os elementos da diagonal principal da matriz D são seus autovalores, e além do mais, P é uma matriz cujas colunas são, respectivamente, n autovetores linearmente independentes de A .

2.1.3 Matrizes simétricas

Definição 2.9 Uma matriz $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ é simétrica se $A = A^T$.

Exemplo 2.10

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 6 \\ -1 & 6 & 0 \end{bmatrix}.$$

As matrizes simétricas têm características particulares em relação aos seus autovalores e autovetores. Antes de enunciar o próximo teorema, é conveniente retomar alguns conceitos a respeito de números complexos.

Considere z um número complexo $a + bi$. O conjugado de z representado por \bar{z} é definido como $a - bi$. A conjugada de uma matriz $B_{n \times n}(C)$ é a matriz denotada por \bar{B} , obtida pela conjugação de cada um dos elementos de B .

Se $z = \bar{z}$, então z é um número real. De fato,

$$z = \bar{z} \Rightarrow z - \bar{z} = 0,$$

mas $z - \bar{z} = 2bi$, portanto $b = 0$ e o número z é real.

Seja v um vetor não nulo tal que $v = \begin{bmatrix} a_1 + b_1i \\ \vdots \\ a_n + b_ni \end{bmatrix}$. Temos que

$$\begin{aligned} \bar{v}^T v &= \begin{bmatrix} a_1 - b_1i & \dots & a_n - b_ni \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 + b_1i \\ \vdots \\ a_n + b_ni \end{bmatrix} = \\ &= a_1^2 + b_1^2 + \dots + a_n^2 + b_n^2 > 0. \end{aligned}$$

Após esta breve revisão, podemos analisar as propriedades nos teoremas que se seguem. A demonstração do próximo teorema foi retirada da referência (POOLE, 2006).

Teorema 2.11 *Todos os autovalores de uma matriz simétrica são reais.*

Demonstração 4 *Seja λ autovalor de uma matriz simétrica A com autovetor correspondente v . Então $Av = \lambda v$ e $\overline{Av} = \overline{\lambda v}$. Observe que*

$$\lambda \bar{v}^T v = \bar{v}^T (\lambda v),$$

pois λ é escalar. Como v é autovetor associado a λ , então

$$\bar{v}^T (\lambda v) = \bar{v}^T Av.$$

Já que A é uma matriz com elementos reais e simétrica, temos as igualdades abaixo

$$\bar{v}^T Av = \bar{v}^T \overline{Av} = (\overline{Av})^T v.$$

O conjugado do produto é o produto dos conjugados. Então

$$(\overline{Av})^T v = (\overline{Av})^T v.$$

Novamente, como v é autovetor associado a λ ,

$$(\overline{Av})^T v = (\overline{\lambda v})^T v = \overline{\lambda} \overline{v}^T v.$$

Assim, temos que

$$(\lambda - \overline{\lambda})(\overline{v}^T v) = 0$$

e como $v \neq 0$ então $\overline{v}^T v \neq 0$. Portanto

$$(\lambda - \overline{\lambda}) = 0,$$

logo $\lambda = \overline{\lambda}$ e λ é real. □

Teorema 2.12 Se A é uma matriz simétrica, então os autovetores associados aos autovalores distintos de A são ortogonais.

Demonstração 5 Sejam u e v autovetores associados aos autovalores λ_1 e λ_2 distintos de uma matriz simétrica A . Sendo assim,

$$Au = \lambda_1 u \text{ e } Av = \lambda_2 v.$$

Agora,

$$\lambda_1 (u^T v) = (\lambda_1 u)^T v.$$

pois produto de escalar por matriz é associativo. Como u é autovetor correspondente a λ_1 e como A é simétrica, então

$$(\lambda_1 u)^T v = (Au)^T v = u^T A^T v = u^T (Av).$$

Como v é autovetor associado a λ_2 e usando a propriedade de que o produto entre escalar e matriz é comutativo, temos que

$$u^T (Av) = u^T (\lambda_2 v) = \lambda_2 (u^T v).$$

Portanto,

$$\lambda_1(u^T v) = \lambda_2(u^T v)$$

e subtraindo, obtemos

$$(\lambda_1 - \lambda_2)(u^T v) = 0.$$

Como $\lambda_1 \neq \lambda_2$, concluímos que $u^T v = 0$, logo u e v são ortogonais. □

Este último resultado contribui para uma importante conclusão sobre diagonalização de matrizes simétricas. Antes de enunciá-la, é necessário apresentar a seguinte definição:

Definição 2.13 Uma matriz P invertível é chamada de matriz ortogonal se

$$P^{-1} = P^T.$$

Podemos também dizer que uma matriz P invertível é ortogonal se $P^T P = I$. Outra equivalência que se tem é o fato de que as colunas (e linhas) de uma matriz são ortonormais se e somente se a matriz é ortogonal.

Exemplo 2.14

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -6 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Podemos perceber que as colunas dessa matriz são ortogonais. Basta apenas multiplicar cada vetor coluna pelo inverso de sua norma para obter a matriz

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{-2}{\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

As colunas da matriz P são ortonormais, logo P é ortogonal. Pela definição, sua inversa também tem que ser ortogonal. Como a inversa é a transposta, logo as linhas de P por consequência são ortonormais.

Antes de prosseguir, devemos retomar a seguinte definição.

Definição 2.15 O complemento ortogonal de um conjunto não-vazio $S \subset \mathbb{R}^n$ é o conjunto S^\perp formado pelos vetores $v \in \mathbb{R}^n$ que são ortogonais a todos os vetores $u \in S$.

Teorema 2.16 Para todo subespaço vetorial $S \subset \mathbb{R}^n$ tem-se a decomposição em soma direta $\mathbb{R}^n = S \oplus S^\perp$.

Demonstração 6 Seja $u_1, \dots, u_n \subset \mathbb{R}^n$ uma base ortonormal cujos primeiros m elementos u_1, \dots, u_m formam uma base ortonormal de S . Para todo vetor $v \in \mathbb{R}^n$ tem-se $v = \alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_n u_n = z + w$, onde $z = \alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_m u_m \in S$ e $w = \alpha_{m+1} u_{m+1} + \dots + \alpha_n u_n \in S^\perp$. Portanto $\mathbb{R}^n = S + S^\perp$. Como $S \cap S^\perp = \{0\}$, segue-se que $\mathbb{R}^n = S \oplus S^\perp$. \square

Corolário 2.17 $\dim S + \dim S^\perp = n$.

Agora temos ferramentas suficientes para enunciar o teorema abaixo.

Teorema 2.18 Se $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ é uma matriz simétrica, então existe uma matriz ortogonal $P_{n \times n}(\mathbb{R})$ tal que $P^T A P = D$, onde D é uma matriz diagonal de ordem n .

Demonstração 7 Vamos provar por indução em n . Para $n = 1$, adotamos $P = [1]$. Claramente P é ortogonal, pois $P^T P = [1] \cdot [1] = [1] = I$. Temos ainda que $P^T A P = [1] A [1] = A$. Como toda matriz 1×1 é diagonal, então A é diagonal. Sendo assim, existe uma P ortogonal tal que $P^T A P = D$ para $n = 1$.

Agora supondo que o resultado seja válido para $(n - 1)$, vamos provar que vale para n . Sejam $v \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que $\|v\| = 1$ e $Av = \lambda v$. Como $v \in \mathbb{R}^n$

e o espaço gerado por v tem dimensão igual a 1, o complemento ortogonal v^\perp tem dimensão $(n - 1)$ devido ao corolário (2.17). Considere então $\{u_1, u_2, \dots, u_{n-1}\}$ uma base ortonormal de v^\perp , e

$$M_{n \times (n-1)}(\mathbb{R}) = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Note que $M^T M = I$, pois pelo produto matricial, encontramos que na linha i o j -ésimo elemento de $M^T M$ é $u_i^T u_j$ e como os vetores são ortonormais,

$$u_i^T u_j = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Temos também que $v^T(Au_j) = (Av)^T u_j = \lambda v^T u_j = 0$, pois qualquer elemento da base é ortogonal a v . Logo, $Au_j \in v^\perp$. Portanto $Au_j = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_{i,j} u_i$. Pelo produto matricial,

$$AM = \begin{bmatrix} Au_1 & Au_2 & \cdots & Au_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Seja $B_{(n-1) \times (n-1)}(\mathbb{R})$ tal que

$$B = \begin{bmatrix} \alpha_{1,1} & \alpha_{1,2} & \cdots & \alpha_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_{n-1,1} & \alpha_{n-1,2} & \cdots & \alpha_{n-1,n-1} \end{bmatrix}.$$

Logo

$$MB = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_{i,1} u_i & \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_{i,2} u_i & \cdots & \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_{i,n-1} u_i \end{bmatrix}.$$

Enfim,

$$\begin{aligned} AM &= MB \\ M^T AM &= M^T MB \\ M^T AM &= B. \end{aligned}$$

A partir disso e usando o fato de A ser simétrica, temos que B é simétrica, pois $B^T = (M^T AM)^T = M^T AM = B$.

Pela hipótese de indução, existem matrizes $Q_{(n-1) \times (n-1)}(\mathbb{R})$, $E_{(n-1) \times (n-1)}(\mathbb{R})$, onde E é diagonal, tais que

$$Q^T Q = I \text{ e } Q^T B Q = E.$$

Construindo

$$P = \begin{bmatrix} v & M Q \end{bmatrix}$$

e

$$D = \begin{bmatrix} \lambda & 0_{1 \times (n-1)} \\ 0_{(n-1) \times 1} & E \end{bmatrix},$$

pelo produto em bloco, temos que:

$$P^T P = \begin{bmatrix} v^T \\ Q^T M^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v & M Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v^T v & v^T M Q \\ Q^T M^T v & Q^T M^T M Q \end{bmatrix}.$$

Observa-se que $v^T v = \|v\|^2 = 1$.

Seja $\beta_{i,j}$ os elementos da matriz Q , o produto $M Q$ ocorre de forma análoga ao produto $M B$, portanto:

$$\begin{aligned} v^T M Q &= \begin{bmatrix} v^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,1} u_i & \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,2} u_i & \cdots & \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,n-1} u_i \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,1} v^T u_i & \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,2} v^T u_i & \cdots & \sum_{i=1}^{n-1} \beta_{i,n-1} v^T u_i \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Como u_i é ortogonal a v , então $v^T M Q$ é igual à matriz nula $1 \times (n-1)$, e, além disso, $Q^T M^T v$, que é a transposta de $v^T M Q$, é igual à matriz nula de ordem $(n-1) \times 1$.

Por fim, o produto $Q^T M^T M Q = Q^T I Q = I_{(n-1) \times (n-1)}$, pois Q é matriz ortogonal por hipótese. Logo

$$\begin{bmatrix} v^T v & v^T M Q \\ Q^T M^T v & Q^T M^T M Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0_{1 \times (n-1)} \\ 0_{(n-1) \times 1} & I_{(n-1) \times (n-1)} \end{bmatrix} = I_{n \times n}$$

e portanto P é ortogonal.

$$P^T AP = \begin{bmatrix} v^T \\ Q^T M^T \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} v & MQ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v^T Av & v^T AMQ \\ Q^T M^T Av & Q^T M^T AMQ \end{bmatrix}.$$

Como

$$v^T Av = v^T \lambda v = \lambda v^T v = \lambda$$

e

$$v^T AMQ = v^T A^T MQ = (Av)^T MQ = \lambda v^T MQ,$$

que é igual à matriz nula de ordem $1 \times (n - 1)$ como já visto.

Analogamente $Q^T M^T Av = Q^T M^T \lambda v = \lambda Q^T M^T v$, que é igual à matriz nula de ordem $(n - 1) \times 1$. Por fim, o produto

$$Q^T M^T AMQ = Q^T BQ = E.$$

Portanto

$$\begin{bmatrix} v^T Av & v^T AMQ \\ Q^T M^T Av & Q^T M^T AMQ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & 0_{1 \times (n-1)} \\ 0_{(n-1) \times 1} & E \end{bmatrix} = D.$$

Portanto existem matrizes P e D , tais que $P^T P = I$ e $P^T AP = D$. \square

Sabemos então que uma matriz simétrica sempre é diagonalizável por uma matriz P ortogonal. Neste caso, dizemos que a matriz simétrica é diagonalizada por uma transformação ortogonal. A recíproca é verdadeira como está demonstrado no próximo teorema.

Teorema 2.19 *Seja $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ uma matriz diagonalizável por uma transformação ortogonal. Então A é simétrica.*

Demonstração 8 *Por hipótese, existe uma matriz ortogonal $P_{n \times n}(\mathbb{R})$ e uma matriz*

diagonal $D_{n \times n}(\mathbb{R})$ tais que

$$D = P^{-1}AP = P^T AP.$$

Como P é ortogonal, temos que $A = PDP^T$. Calculando a transposta de A temos que

$$A^T = (PDP^T)^T = (P^T)^T D^T P^T = PDP^T = A,$$

onde $D^T = D$ pois D é matriz diagonal. Portanto, A é simétrica. \square

Assim, seguindo os teoremas apresentados até agora, o processo de diagonalização de uma matriz simétrica de ordem n é o seguinte:

Etapa 1: Forme o polinômio característico $p(\lambda) = \det(\lambda I_n - A)$.

Etapa 2: Encontre as raízes do polinômio característico de A . Elas serão todas reais.

Etapa 3: Para cada autovalor λ_j de A de multiplicidade k_j , encontre k_j autovetores linearmente independentes que sejam solução de $(\lambda_j I_n - A)x = 0$.

Etapa 4: Para cada autovalor, transforme os autovetores correspondentes obtidos na etapa 3 para autovetores ortonormais pelo processo de Gram-Schmidt. A totalidade de todos os autovetores determina um conjunto ortonormal com n elementos.

Etapa 5: Seja P a matriz cujas colunas são n autovetores ortonormais determinados na etapa 4. Então P é uma matriz ortogonal e $P^{-1}AP = P^T AP = D$ é uma matriz diagonal cujos elementos da diagonal são os autovalores de A que correspondem às colunas de P .

2.2 Matriz definida positiva

Após analisar o processo de diagonalização de matrizes simétricas, vamos apresentar, nesta seção, uma classificação relacionada ao seu comportamento em funções. Vamos estudar as propriedades e algumas aplicações dessa classificação.

2.2.1 Uma aplicação ao cálculo

Em Cálculo Diferencial e Integral, um tópico estudado é o problema de encontrar máximos e mínimos de funções de várias variáveis com valores reais. Assim, será apresentada uma aplicação e também motivação da classificação dada na próxima subseção.

Definição 2.20 *Seja f uma função com valores reais definida em \mathbb{R}^n . Um ponto x^* em \mathbb{R}^n é dito um ponto estacionário de f se todas as derivadas parciais de f em x^* existem e são iguais a 0.*

Se f tem um máximo local ou um mínimo local em x^* e se as derivadas parciais de f existem em x^* , então elas são todas nulas. Logo, se f tiver derivadas parciais em todos os pontos, seus máximos e mínimos locais vão ocorrer em pontos estacionários. Considere a função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por:

$$f(x_1, x_2) = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2,$$

onde a, b e c são escalares. As derivadas parciais de primeira ordem de f são

$$f_{x_1} = 2ax_1 + 2bx_2$$

$$f_{x_2} = 2bx_1 + 2cx_2,$$

igualando a zero, vemos que $(0,0)$ é um ponto estacionário. Esta função pode ser escrita da seguinte maneira:

$$f(x) = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x^T Ax.$$

Assim, se a matriz A for invertível, então esse será o único ponto estacionário. Como $f(0) = 0$, f vai possuir mínimo global em 0 se e somente se

$$x^T Ax > 0 \text{ para todo } x \neq 0$$

e f vai ter máximo global em 0 se e somente se

$$x^T Ax < 0 \text{ para todo } x \neq 0.$$

Se $x^T Ax$ não ter sinal constante, 0 será ponto de sela.

A expressão $x^T Ax$, onde A é matriz simétrica e x é vetor de \mathbb{R}^n é definida como forma quadrática. A análise do seu sinal é relevante para determinar os extremantes da função. De acordo com o sinal, existe a seguinte classificação para a forma quadrática $f(x) = x^T Ax$:

- f é dita definida positiva se $x^T Ax > 0$ para todos os vetores não nulos x em \mathbb{R}^n .
- f é dita definida negativa se $x^T Ax < 0$ para todos os vetores não nulos x em \mathbb{R}^n .
- f é indefinida, se $x^T Ax$ não possui sinal constante.

A forma quadrática é classificada como definida positiva ou definida negativa de acordo com a matriz A . Se a forma quadrática é dita definida positiva, dizemos simplesmente que A é definida positiva. Da mesma forma, ocorre para as outras classificações.

2.2.2 Matriz definida positiva

Como já visto, uma matriz simétrica real A é dita definida positiva se $x^T Ax > 0$ para todo x em \mathbb{R}^n diferente de zero. O teorema seguinte apresenta uma equivalência dessa classificação.

Teorema 2.21 *Seja $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ uma matriz simétrica. Então, A é definida positiva se e somente se todos os seus autovalores são positivos.*

Demonstração 9 *Se A é definida positiva e se λ é um autovalor de A , então, para qualquer autovetor x associado a λ ,*

$$x^T Ax = x^T \lambda x.$$

Como o produto de escalar por matriz é comutativo e associativo, então

$$x^T \lambda x = \lambda x^T x = \lambda \|x\|^2.$$

Logo,

$$\lambda = \frac{x^T Ax}{\|x\|^2} > 0.$$

Reciprocamente, suponha que todos os autovalores de A são positivos. Como A é simétrica, é possível escolher um conjunto ortonormal $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ de autovetores de A . Claramente, este conjunto é uma base do espaço \mathbb{R}^n . Seja x um vetor não nulo em \mathbb{R}^n , então x pode ser escrito como

$$x = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_n x_n.$$

Temos, então, que

$$\begin{aligned} x^T Ax &= (\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_n x_n)^T (\alpha_1 Ax_1 + \alpha_2 Ax_2 + \dots + \alpha_n Ax_n) = \\ &= (\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_n x_n)^T (\alpha_1 \lambda_1 x_1 + \alpha_2 \lambda_2 x_2 + \dots + \alpha_n \lambda_n x_n). \end{aligned}$$

Utilizando a hipótese de que $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ é um conjunto ortonormal, então

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^n (\alpha_i)^2 \lambda_i.$$

Como x é não nulo, existe pelo menos um $\alpha_i \neq 0$ logo

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^n (\alpha_i)^2 \lambda_i \geq (\min \lambda_i) \|x\|^2 > 0$$

e, portanto, A é definida positiva. □

Ou seja, para analisar se a matriz é definida positiva, basta analisar o sinal do seus autovalores. Se todos os autovalores de A são positivos, então ela é definida positiva. Analogamente, se todos os autovalores são negativos, ela é definida negativa. E se A tem autovalores com sinais diferentes, então ela é indefinida.

Exemplo 2.22 *Seja*

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 7 \end{bmatrix}.$$

Os autovalores de A são 3 e 8. Portanto A é definida positiva.

2.2.3 Algumas propriedades

Após essa breve discussão sobre a equivalência de definições da matriz definida positiva, vamos agora analisar algumas de suas propriedades.

Teorema 2.23 *Se A é uma matriz definida positiva, então $\det(A) > 0$.*

Demonstração 10 *Se $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ definida positiva, então A é uma matriz simétrica e, portanto, diagonalizável. Seja D a matriz diagonal formada pelos autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de A e P a matriz ortogonal formada pelos autovetores de A . Temos que $P^{-1}AP = D$. Aplicando determinante nos dois lados da equação, temos:*

$$\det(P^{-1}AP) = \det(D).$$

Como o determinante do produto é o produto de determinantes, então

$$\det(P^{-1})\det(A)\det(P) = \det(D).$$

Como o determinante de matriz inversa é o inverso do determinante, então

$$\det(A) = \det(D).$$

Como o $\det(A) = \det(D) = \lambda_1\lambda_2 \dots \lambda_n$, e como todos os autovalores de A são positivos, então $\det(A) > 0$. □

A recíproca não é verdadeira. Seja:

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

Como pode se observar no exemplo, o $\det(A) = 6 > 0$ e os autovalores de A são -2 e -3 . Portanto, apesar da matriz possuir determinante positivo, seus autovalores são negativos e ela é definida negativa.

O próximo teorema aponta uma propriedade sobre a inversa da matriz definida positiva.

Teorema 2.24 *Se A é uma matriz definida positiva, então A é invertível e A^{-1} também é definida positiva.*

Demonstração 11 *Seja A uma matriz definida positiva. Pelo teorema anterior, $\det(A) > 0$, portanto A é invertível. Como os autovalores da matriz inversa de A são o inverso dos autovalores de A e como o inverso de um número positivo é positivo, então, A^{-1} é definida positiva. \square*

Exemplo 2.25

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

Sabemos que A é definida positiva, pois seus autovalores são 1 e 6 . A inversa de A é

$$\begin{bmatrix} \frac{5}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}.$$

Seus autovalores são exatamente 1 e $\frac{1}{6}$. Portanto, a inversa é também definida positiva.

Definição 2.26 *Dada uma matriz $A_{n \times n}(\mathbb{R})$, vamos denotar por A_r a matriz obtida retirando-se $(n - r)$ linhas e colunas de A . A_r é chamada de submatriz principal de A de ordem r .*

Agora podemos enunciar o seguinte teorema:

Teorema 2.27 *Se a matriz A é definida positiva então as submatrizes principais A_1, A_2, \dots, A_n de A têm determinante positivo.*

Demonstração 12 *É possível perceber que para $1 \leq r \leq n$ e tomando $x_r = (x_1, x_2, \dots, x_r)^T$ um vetor não nulo arbitrário em \mathbb{R}^r e $x = (x_1, \dots, x_r, 0, \dots, 0)^T$ um vetor não nulo de \mathbb{R}^n , temos que, pelo produto matricial,*

$$x_r^T A_r x_r = x^T A x > 0.$$

Portanto, A_r é definida positiva. □

Exemplo 2.28

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 3 \\ 0 & 3 & 5 \end{bmatrix}.$$

Calculando seus autovalores, obtemos $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 8$, ambos positivos. Analisando o determinante das submatrizes, temos que:

$$\det(A_1) = 2$$

$$\det(A_2) = 10$$

$$\det(A_3) = 32.$$

Como todos os seus autovalores são positivos, a matriz A é definida positiva. Portanto, todas as submatrizes de A têm determinante positivo.

Para finalizar, vamos apresentar a seguinte propriedade:

Teorema 2.29 *Se A é uma matriz definida positiva, então os elementos diagonais de A são todos positivos.*

Demonstração 13 *Como A é definida positiva, então $x^T A x > 0$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo. Dessa forma, tomando $x = e_i$, onde e_i é o vetor que possui todas as componentes nulas exceto a componente i que equivale a 1, temos que $e_i^T A e_i = a_{ii} > 0$. Portanto, todos os elementos da diagonal de A são positivos. □*

Assim estão listadas algumas propriedades de matrizes definidas positivas. Para finalizar o capítulo, vamos apresentar a fatoração QR , utilizada nos testes computacionais para a construção de matrizes ortogonais.

2.3 Fatoração QR

2.3.1 Processo de Gram-Schmidt

Antes de falar sobre fatoração QR , é necessário retomar o processo de Gram-Schmidt. Este processo tem o objetivo de ortonormalizar uma base dada para um espaço vetorial de dimensão n munido de um produto interno.

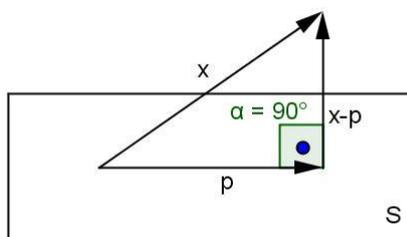
Teorema 2.30 *Seja S um subespaço do espaço V munido de produto interno, onde $\dim V < \infty$, e seja $x \in V$. Seja $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ uma base ortonormal para S . Se*

$$p = \sum_{j=1}^n c_j x_j,$$

onde $c_j = x^T x_j$ para todo j então $x - p \in S^\perp$.

Observe geometricamente o teorema.

Figura 1: Projeção ortogonal



Como p é a projeção ortogonal do vetor x em S , então, o vetor $x - p$ é perpendicular ao subespaço S .

Demonstração 14 *Vamos provar inicialmente que $(x - p) \perp x_j$ para todo j .*

$$x_j^T(x - p) = x_j^T x - x_j^T p = c_j - x_j^T \sum_{t=1}^n c_t x_t.$$

Como escalar é associativo e comutativo no produto, então temos que

$$c_j - x_j^T \sum_{t=1}^n c_t x_t = c_j - \sum_{t=1}^n c_t x_j^T x_t.$$

Como $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ é uma base ortonormal, então $\sum_{t=1}^n c_t x_j^T x_t = c_j$ e portanto

$$x_j^T(x - p) = 0.$$

Assim, $(x - p)$ é ortogonal a todos os x_i . Se $y \in S$, então

$$y = \sum_{j=1}^n \alpha_j x_j$$

de modo que

$$(x - p)^T y = (x - p)^T \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j x_j \right) = \sum_{j=1}^n \alpha_j (x - p)^T x_j.$$

Devido ao resultado anterior, temos que

$$(x - p)^T y = 0.$$

□

Teorema 2.31 *Seja $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ uma base para o espaço V munido de produto interno. Seja*

$$u_1 = \frac{1}{\|x_1\|} x_1$$

e defina u_2, \dots, u_n por

$$u_{k+1} = \frac{1}{\|x_{k+1} - p_k\|} (x_{k+1} - p_k)$$

para k variando de 1 a $(n - 1)$ onde

$$p_k = (x_{k+1}^T u_1)u_1 + (x_{k+1}^T u_2)u_2 + \dots + (x_{k+1}^T u_k)u_k$$

é a projeção ortogonal de x_{k+1} sobre $[u_1, u_2, \dots, u_n]$. Então o conjunto $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ é uma base ortonormal de V .

Demonstração 15 Vamos provar por indução. É claro que $[u_i] = [x_i]$, pois os dois vetores são múltiplos. Suponha que construímos u_1, u_2, \dots, u_k de modo que $\{u_1, u_2, \dots, u_k\}$ seja um conjunto ortonormal e que

$$[u_1, u_2, \dots, u_k] = [x_1, x_2, \dots, x_k].$$

Como p_k é uma combinação linear dos u_j para $1 \leq j \leq k$, temos que $p_k \in [x_1, x_2, \dots, x_k]$ e que $x_{k+1} - p_k \in [x_1, x_2, \dots, x_{k+1}]$, pois $x_{k+1} - p_k = x_{k+1} - \sum_{j=1}^k c_j x_j$, ou seja, $x_{k+1} - p_k$ pode ser escrito com combinação linear de $\{x_1, x_2, \dots, x_{k+1}\}$.

Como x_1, \dots, x_{k+1} são linearmente independentes, temos que $x_{k+1} - p_k$ é diferente de zero e pelo Teorema (2.30), é ortogonal a cada um dos u_j , $1 \leq j \leq k$. Portanto, $\{u_1, u_2, \dots, u_{k+1}\}$ é um conjunto ortonormal de vetores em $[x_1, x_2, \dots, x_{k+1}]$. Como u_1, \dots, u_{k+1} são linearmente independentes, eles formam uma base para $\{x_1, x_2, \dots, x_{k+1}\}$, logo

$$[u_1, u_2, \dots, u_{k+1}] = [x_1, x_2, \dots, x_{k+1}].$$

Assim, por indução, $[u_1, u_2, \dots, u_{k+1}]$ é uma base ortonormal para V . □

Exemplo 2.32 Seja $x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}$ e $x_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}$ vetores de \mathbb{R}^2 . Como eles são linearmente independentes, eles formam uma base linear de \mathbb{R}^2 . Utilizando o processo de Gram-Schmidt, podemos ortonormalizá-los. Primeiramente, temos que $\|x_1\| = \sqrt{17}$

então

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{17}} \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{17}} \\ \frac{4}{\sqrt{17}} \end{bmatrix}.$$

Defina

$$p_1 = (x_2^T u_1) u_1 = \frac{14}{\sqrt{17}} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{17}} \\ \frac{4}{\sqrt{17}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{14}{17} \\ \frac{56}{17} \end{bmatrix}.$$

Como $x_2 - p_1 = \begin{bmatrix} \frac{20}{17} \\ -\frac{5}{17} \end{bmatrix}$ e $\|x_2 - p_1\| = \frac{5\sqrt{17}}{17}$, então

$$u_2 = \frac{1}{\|x_2 - p_1\|} (x_2 - p_1) = \begin{bmatrix} \frac{4}{\sqrt{17}} \\ -\frac{1}{\sqrt{17}} \end{bmatrix}.$$

Assim, $\{u_1, u_2\}$ formam uma base ortonormal de \mathbb{R}^2 .

2.3.2 Fatoração QR

Definição 2.33 Seja $A_{m \times n}(\mathbb{R})$. Defina a imagem de A , denotada por $I(A)$, como

$$I(A) = \{b \in \mathbb{R}^m \mid b = Ax \text{ para algum } x \in \mathbb{R}^n\} = \text{o espaço coluna de } A.$$

Definição 2.34 O posto de uma matriz A é a dimensão de sua imagem.

Teorema 2.35 Se $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ é uma matriz de posto h , então A pode ser fatorada em um produto QR , onde Q é uma matriz $m \times n$ com colunas ortonormais e R é uma matriz $n \times n$ triangular superior e invertível.

Demonstração 16 Seja p_1, p_2, \dots, p_{n-1} definida como no teorema (2.31) e seja $\{q_1, q_2, \dots, q_n\}$ a base ortonormal de $I(A)$ obtida pelo processo de Gram-Schmidt. Considere que a_j é a j -ésima coluna da matriz A . Defina

$$r_{1,1} = \|a_1\|$$

$$r_{k,k} = \|a_k - p_{k-1}\|$$

para $k = 2, \dots, n$ e

$$r_{i,k} = q_i^T a_k$$

para $i = 1, \dots, (k-1)$ e $k = 2, \dots, n$. Pelo processo de Gram-Schmidt, temos que

$$r_{1,1}q_1 = a_1$$

$$r_{k,k}q_k = a_k - r_{1,k}q_1 - r_{2,k}q_2 - \dots - r_{k-1,k}q_{k-1}$$

para $k = 2, \dots, n$. Esse sistema pode ser colocado da seguinte forma:

$$a_1 = r_{1,1}q_1$$

$$a_2 = r_{1,2}q_1 + r_{2,2}q_2$$

$$\vdots$$

$$a_n = r_{1,n}q_1 + \dots + r_{n,n}q_n.$$

Definindo

$$Q = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{bmatrix}$$

e R como matriz triangular superior,

$$R = \begin{bmatrix} r_{1,1} & r_{1,2} & \dots & r_{1,n} \\ 0 & r_{2,2} & \dots & r_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & r_{n,n} \end{bmatrix}$$

temos que a j -ésima coluna do produto QR é

$$Qr_j = r_{1,j}q_1 + r_{2,j}q_2 + \dots + r_{j,j}q_j = a_j$$

para $j = 1, \dots, n$. Portanto,

$$QR = (a_1, a_2, \dots, a_n) = A.$$

□

Ou seja, a decomposição QR é uma interpretação matricial do processo de Gram-Schmidt. Ela será utilizada no trabalho para gerar matrizes ortogonais.

Exemplo 2.36 Calculando a fatoração QR da matriz

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

obtemos

$$r_{11} = \|a_1\| = 5$$

$$q_1 = \frac{1}{r_{11}}a_1 = \begin{bmatrix} \frac{3}{5} \\ \frac{4}{5} \end{bmatrix}$$

$$r_{12} = q_1^T a_2 = 2$$

$$p_1 = r_{12}q_1 = 2q_1 = \begin{bmatrix} \frac{6}{5} \\ \frac{8}{5} \end{bmatrix}$$

$$a_2 - p_1 = \begin{bmatrix} \frac{4}{5} \\ -\frac{3}{5} \end{bmatrix}$$

$$r_{22} = \|a_2 - p_1\| = 1$$

$$q_2 = \frac{1}{r_{22}}(a_2 - p_1) = \begin{bmatrix} \frac{4}{5} \\ -\frac{3}{5} \end{bmatrix}.$$

Portanto

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = QR.$$

Estes tópicos de Álgebra Linear foram fundamentais para o desenvolvimento teórico do método que será apresentado no próximo capítulo.

3 MINIMIZAÇÃO DE FUNÇÕES QUADRÁTICAS

Neste capítulo trataremos do problema de minimizar funções quadráticas reais de várias variáveis. Trabalharemos com métodos iterativos que têm como objetivo encontrar o minimizador da função. Será apresentado o método de Cauchy para minimização irrestrita com um interesse particular em analisar as suas propriedades para funções quadráticas tomando como comprimento do passo o inverso dos autovalores da Hessiana da quadrática. As principais referências são (LI; WANG, 2001) e (SANTOS; XAVIER, 2005).

3.1 Funções quadráticas

Uma equação quadrática em duas variáveis x e y é uma equação da forma

$$ax^2 + 2bxy + cy^2 + dx + ey + f = 0.$$

Esta equação pode ser colocada na forma

$$\begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d & e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + f = 0.$$

Seja $x = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$, $A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$, $B = \begin{bmatrix} d & e \end{bmatrix}$ e $C = f$, então a equação quadrática passa a ser

$$x^T Ax + B^T x + C = 0.$$

Baseando-se nesse exemplo, damos a seguinte definição:

Definição 3.1 Considere $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ uma matriz simétrica, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$, definimos função quadrática $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c.$$

Como trabalharemos bastante com a derivada desta função, a forma quadrática foi multiplicada por $\frac{1}{2}$ para simplificar os cálculos. Note que a matriz Hessiana dessa função, que é a sua derivada de ordem 2, é exatamente a matriz A . Antes de analisá-la, vamos rever algumas definições de Cálculo Diferencial e Integral retiradas de (H.L.GUIDORIZZI, 2001).

Definição 3.2 Sejam f uma função e $x^* \in D_f$. Dizemos que x^* é ponto de mínimo global ou minimizador de f se $f(x) \geq f(x^*)$ para todo $x \in D_f$. Analogamente, dizemos que x^* é ponto de máximo global ou maximizador de f se $f(x) \leq f(x^*)$ para todo $x \in D_f$.

Definição 3.3 Seja $z = f(x, y)$ uma função real de duas variáveis reais para (x, y) pertencentes a um conjunto H . O conjunto

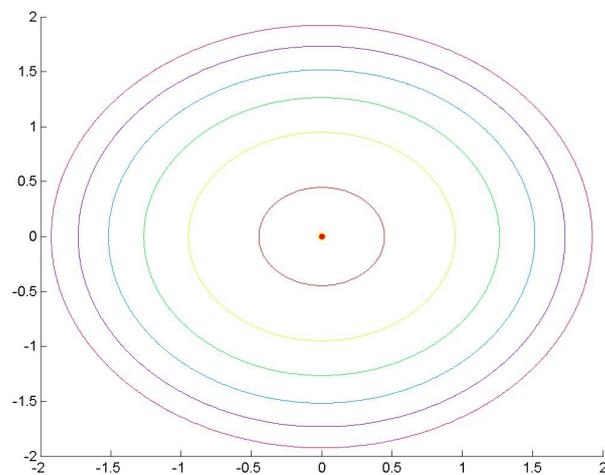
$$G_f = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid z = f(x, y), (x, y) \in H\}$$

denomina-se gráfico de f .

Definição 3.4 Seja $z = f(x, y)$ uma função e $p \in Im.f$. O conjunto de todos os pontos (x, y) de D_f tais que $f(x, y) = p$ denomina-se curva de nível de f correspondente ao nível $z = p$. Assim f é constante sobre cada curva de nível.

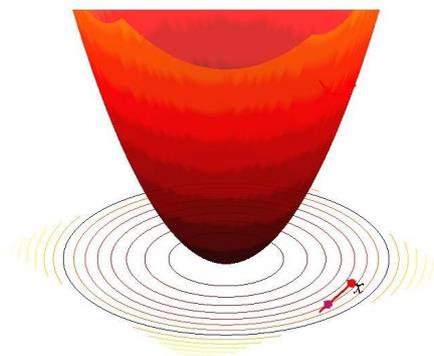
Exemplo 3.5 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $f(x) = x^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} x$.
Suas curvas de nível estão representadas na figura 2.

Figura 2: Curvas de nível



Podemos observar que as curvas de nível são circunferências de centro comum no ponto $(0,0)$. Sabemos que a derivada da função nesse ponto é nula. Portanto é ponto estacionário. Analisando o gráfico, fica evidente que este é ponto de mínimo global da função.

Figura 3: Gráfico



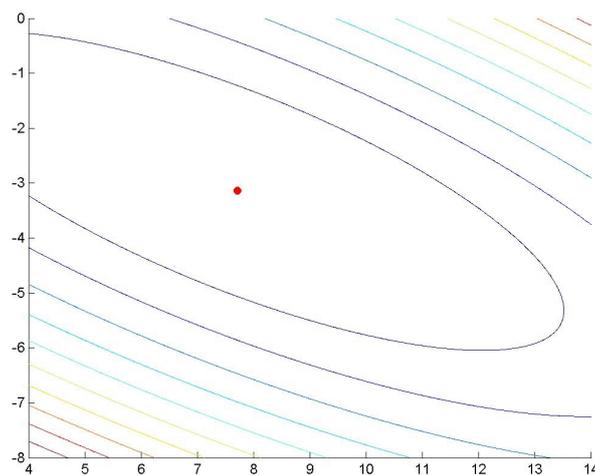
Como em funções quadráticas a matriz A é simétrica, podemos analisar a influência do sinal da matriz no comportamento da função.

Exemplo 3.6 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$f(x) = x^T \begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} & 4 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} -6 & 2 \end{bmatrix} x$$

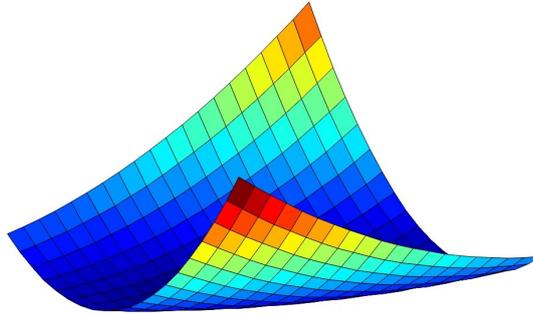
Neste caso, a matriz A é definida positiva. Observe as curvas de nível de f na figura 4.

Figura 4: Curvas de nível



Note que as curvas de nível são elipses. Através da derivada e desta figura, sabemos que seu único ponto estacionário é $(\frac{54}{7}, -\frac{22}{7})$. Com o gráfico fica novamente evidente que este ponto é o minimizador da função.

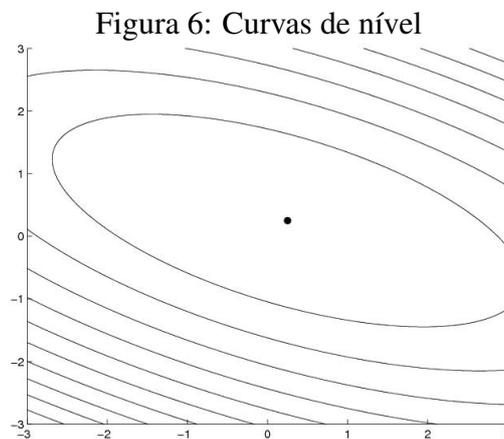
Figura 5: Gráfico



Exemplo 3.7 Considere agora $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

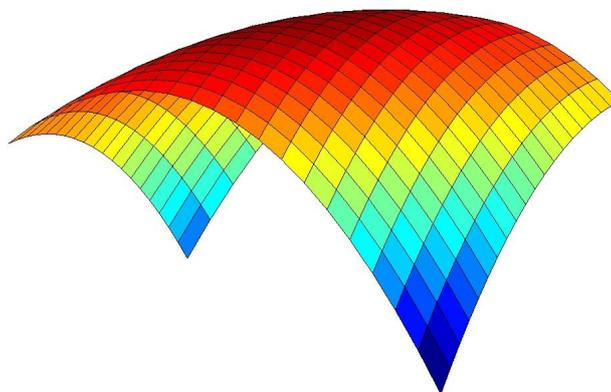
$$f(x) = x^T \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -3 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 1 & 2 \end{bmatrix} x.$$

A figura 6 mostra algumas curvas de nível de f .



Neste exemplo, a matriz A é definida negativa. Observe que as curvas de nível são novamente elipses, mas, a medida que a função se afasta do ponto estacionário, seu valor passa a diminuir. Através da derivada e desta figura, sabemos que seu único ponto estacionário é $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Com o gráfico, fica evidente que este é ponto de máximo global da função.

Figura 7: Gráfico



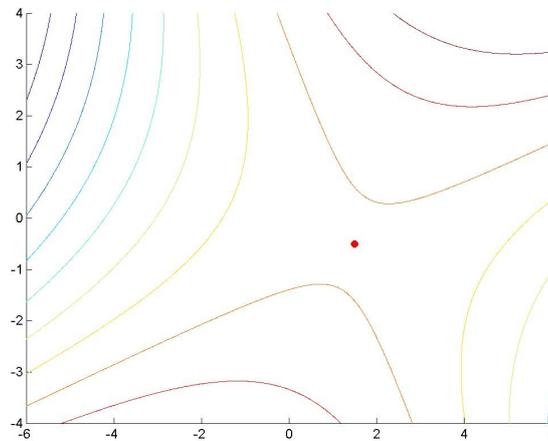
Exemplo 3.8 Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$f(x) = x^T \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 4 & -2 \end{bmatrix} x$$

Analisando o último caso, temos que a matriz A é indefinida. Suas curvas de nível são hipérbolas como mostra a figura 8.

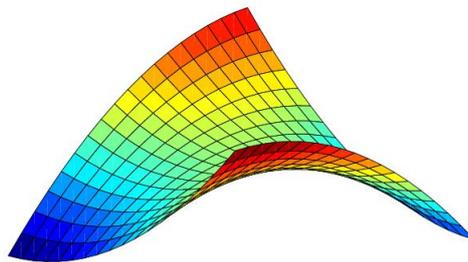
Através da derivada e desta figura, sabemos que o único ponto estacionário de f é $(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2})$.

Figura 8: Curvas de nível



Com o gráfico fica evidente que este ponto estacionário é ponto de sela da função.

Figura 9: Gráfico



Com base nos exemplos, se a Hessiana da função quadrática é definida positiva, então o ponto estacionário será mínimo global da função. Como o nosso objetivo é minimizar funções quadráticas, no decorrer do trabalho a matriz Hessiana será definida positiva por hipótese. A seguir, vamos analisar algumas propriedades de Geometria Analítica que serão utilizadas para simplificar os cálculos futuros.

Note que $\nabla f(x) = Ax + b$, ou seja, o vetor gradiente de f independe de c . Assim, c só influencia no valor mínimo da função, mas não altera o minimizador. Dessa

forma, devido aos nossos interesses, vamos tratar f apenas como $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x$.

Para simplificar a notação, vamos transladar o minimizador da função, considerando $x = z + x^*$, onde x^* é o minimizador de f , $z \in \mathbb{R}^n$ e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} F(z) &= f(z + x^*) = \frac{1}{2}(z + x^*)^T A(z + x^*) + b^T(z + x^*) = \\ &= \frac{1}{2}z^T Az + (x^*)^T Az + b^T z + \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^* + b^T x^*. \end{aligned}$$

Como $x^* = -A^{-1}b$, então

$$F(z) = \frac{1}{2}z^T Az + (-A^{-1}b)^T Az + b^T z + \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^* + b^T x^* = \frac{1}{2}z^T Az + f(x^*).$$

Assim, já que $f(x^*)$ é uma constante, este termo não altera no minimizador da função, portanto, podemos nos preocupar em apenas encontrar o minimizador de funções $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $F(z) = \frac{1}{2}z^T Az$, pois minimizar f é o mesmo que minimizar F . Deste modo, vamos trabalhar apenas com F , já que a função é mais simples e o seu minimizador é sempre o vetor nulo. As propriedades de minimização que valerem para F valerão para f .

3.2 Método de Cauchy

O problema considerado em nosso estudo consiste em minimizar f sem restrições, com $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que f seja uma função quadrática. Podemos nos preocupar então em apenas minimizar $F(z) = \frac{1}{2}z^T Az$ onde $z = x - x^*$. Os algoritmos que resolvem estes problemas, quase sempre iterativos, iniciam com um ponto dado e determinam uma direção ao longo da qual é possível diminuir o valor da função, e nesta direção calcula-se um comprimento de passo que permita uma redução razoável do valor da função. Ou seja, para construir um modelo de algoritmo geral para Minimização Irrestrita, consideramos basicamente três etapas, a partir de $z^k \in \mathbb{R}^n$.

1. Escolha da direção de descida: tomar $d^k \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla F(z^k)^T d^k < 0$.
2. Determinar o tamanho do passo: calcular $\beta^k > 0$.
3. Tomar $z^{k+1} = z^k + \beta^k d^k$.

Assim, o processo se repete, de modo que a cada iteração temos um novo passo e o gradiente é aplicado no vetor resultante da iteração anterior. Dessa maneira, diferentes escolhas para a direção e para a determinação do passo originam métodos iterativos distintos.

Um método clássico de Minimização Irretrita é o Método de Cauchy que corresponde a escolher a direção de máxima descida, ou seja, oposta ao gradiente da função. Já em relação ao tamanho do passo, existem variâncias. Vamos analisar agora duas delas.

3.2.1 Busca Exata

Na busca linear exata, caso a função objetivo seja quadrática, tomamos como tamanho do passo a seguinte expressão:

$$\beta^k = \frac{(\nabla F(z^k))^T \nabla F(z^k)}{(\nabla F(z^k))^T A \nabla F(z^k)}. \quad (3.1)$$

Assim, o algoritmo é dado da seguinte maneira:

Algoritmo 3.9 Dado $z^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

Repita

$$d^k = -\nabla F(z^k)$$

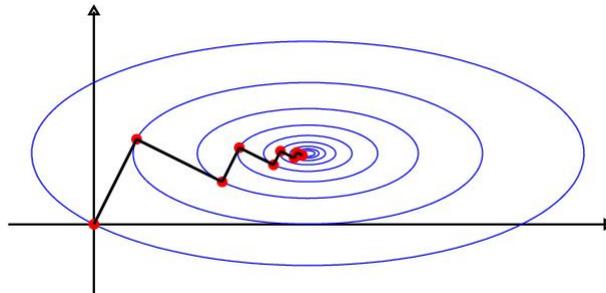
$$\beta^k = \frac{(\nabla F(z^k))^T \nabla F(z^k)}{(\nabla F(z^k))^T A \nabla F(z^k)}$$

$$z^{k+1} = z^k + \beta^k d^k$$

$$k = k + 1$$

Em cada iteração, o algoritmo procura o menor valor da função na direção escolhida e este passa a ser o novo z^k . Assim, a trajetória do algoritmo é sempre normal à curva de nível que passa por z^k , pois a direção tomada é oposta ao vetor gradiente em z^k . Observe no exemplo.

Figura 10: Trajetória do algoritmo de Cauchy



A figura representa a trajetória do algoritmo na função

$$f(x) = x^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} -6 & -12 \end{bmatrix} x + 7.$$

Como é possível perceber, o algoritmo de Cauchy com a busca linear exata possui um comportamento lento devido a esse zigue-zague que o método faz até atingir o minimizador.

Assim, para corrigir este problema, adotamos outra maneira para se calcular o tamanho do passo, que será apresentada na próxima subseção.

3.2.2 Passo dado pelo inverso dos autovalores da Hessiana

Considere $A_{n \times n}(\mathbb{R})$ uma matriz simétrica e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $F(z) = \frac{1}{2}z^T A z$. Todos os autovalores de A são positivos e não nulos. Dessa forma, podemos definir o tamanho do passo como sendo, a cada iteração, o inverso de um

autovalor distinto de A . Assim, o algoritmo é escrito como:

Algoritmo 3.10 Dado $z^0 \in \mathbb{R}^n$

$k = 0$

Repita

$$d^k = -\nabla F(z^k)$$

$$\beta^k = \frac{1}{\lambda_{\ell_k}}$$

$$z^{k+1} = z^k + \beta^k d^k$$

$$k = k + 1$$

Este método possui um desempenho melhor que o apresentado na subseção anterior, mas, antes de analisar suas propriedades, faremos mais uma troca de coordenadas para simplificar a notação.

Como A é simétrica, existe uma matriz ortogonal $P_{n \times n}(\mathbb{R})$ tal que $P^T A P = D$, com D diagonal. Considere a mudança de coordenadas $y = P^T z$ e defina $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$g(y) = F(Py) = \frac{1}{2}(Py)^T A Py = \frac{1}{2}y^T P^T A Py = \frac{1}{2}y^T D y.$$

Como as funções F e g se relacionam pela mudança de coordenadas $y = P^T x$, vamos discutir as propriedades do algoritmo usando a função g cuja Hessiana é diagonal. O minimizador dessa função continua sendo o vetor nulo. A respeito do desempenho do método, temos os seguintes lemas:

Lema 3.11 Dado y^0 um ponto inicial arbitrário de \mathbb{R}^n . Considere

$$y^{k+1} = y^k - \frac{1}{\lambda_{\ell_k}} \nabla g(y^k).$$

Então a componente ℓ_k do vetor y^{k+1} é nula.

Demonstração 17 *Analisando o algoritmo, temos que:*

$$y^{k+1} = y^k - \frac{1}{\lambda_{\ell_k}} (\nabla g(y^k)).$$

Calculando o vetor gradiente, obtemos:

$$y^{k+1} = y^k - \frac{1}{\lambda_{\ell_k}} D y^k.$$

Colocando y^k em evidência à direita, temos

$$y^{k+1} = \left(I_n - \frac{1}{\lambda_{\ell_k}} D \right) y^k.$$

A componente i desse vetor é:

$$y_i^{k+1} = \left(1 - \frac{\lambda_i}{\lambda_{\ell_k}} \right) y_i^k.$$

Tomando $i = \ell_k$, temos que

$$y_i^{k+1} = \left(1 - \frac{\lambda_{\ell_k}}{\lambda_{\ell_k}} \right) y_i^k = 0$$

□

Ou seja, a cada iteração o algoritmo zera uma componente do vetor inicial. Se a matriz A possuir autovalores repetidos j vezes então, de acordo com a demonstração anterior, em uma única iteração, j componentes serão zeradas. Para que a função seja minimizada, as componentes zeradas devem permanecer zeradas nas próximas iterações. Isto é garantido pelo próximo lema.

Lema 3.12 *Se $y_i^{k+1} = 0 \Rightarrow y_i^{k+2} = 0$.*

Demonstração 18 *Seja $y^{k+2} = \left(I_n - \frac{1}{\lambda_{\ell_{k+1}}} D \right) y^{k+1}$. Então, a componente i do vetor y^{k+2} é*

$$y_i^{k+2} = \left(1 - \frac{\lambda_i}{\lambda_{\ell_{k+1}}} \right) y_i^{k+1}.$$

Como $y_i^{k+1} = 0$, então $y_i^{k+2} = 0$.

□

Assim, se o domínio da função quadrática é \mathbb{R}^n então o algoritmo minimiza esta função em no máximo n passos, já que se a matriz A possuir autovalores repetidos, o algoritmo zera mais de uma componente em uma única iteração. A ordem em que as componentes são zeradas equivale a ordem em que os autovalores são escolhidos na expressão do algoritmo. Vamos analisar esta propriedade no próximo exemplo.

Exemplo 3.13 Considere $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $g(y) = y^T \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} y$. O minimizador da função é o vetor nulo e os autovalores de A são os mesmos que da sua matriz diagonal, portanto são 2, 5 e 4. Como os três autovalores são distintos, sabemos que o algoritmo minimizará a função em três passos. Dado o ponto inicial $y^0 = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 10 \end{bmatrix}$. Se queremos que a componente que equivale a 10 seja zerada, basta escolher o autovalor que está na terceira linha e terceira coluna da matriz D para a expressão do algoritmo. De fato:

$$y^1 = y^0 - \frac{1}{4}Dy^0 = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 10 \end{bmatrix} - \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 8 \\ 5 \\ 40 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ \frac{-1}{4} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Dando sequência ao processo, se queremos que a componente que equivale a $\frac{-1}{4}$ seja zerada, basta escolher o autovalor que está na segunda linha e segunda coluna da matriz D . Assim temos

$$y^2 = y^1 - \frac{1}{5}Dy^1 = \begin{bmatrix} 2 \\ \frac{-1}{4} \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 4 \\ -\frac{5}{4} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{6}{5} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Por fim, utilizando o autovalor que sobrou temos

$$y^3 = y^2 - \frac{1}{2}Dy^2 = \begin{bmatrix} \frac{6}{5} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{12}{5} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Assim, para zerar uma determinada componente, basta escolher o autovalor que ocupa a posição correspondente a ela na matriz D . Vamos analisar agora este próximo exemplo.

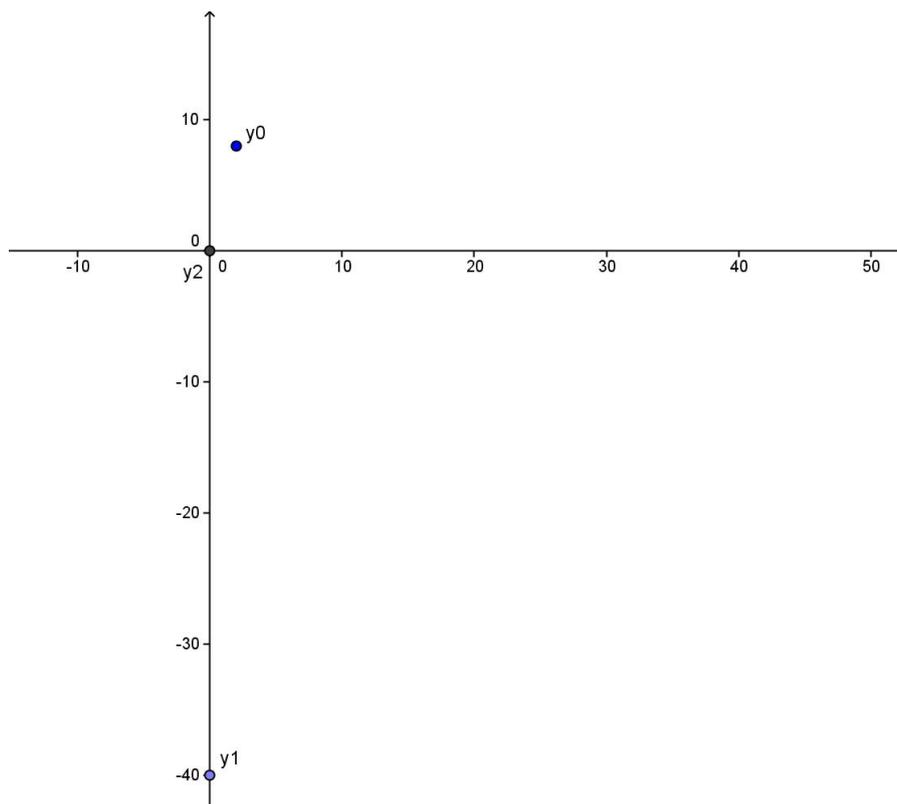
Exemplo 3.14 $g(y) = y^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix} y$. Tomando $y^0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 8 \end{bmatrix}$, temos:

$$y^1 = y^0 - \frac{1}{1} D y^0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 8 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 48 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -40 \end{bmatrix}$$

$$y^2 = y^1 - \frac{1}{6} D y^1 = \begin{bmatrix} 0 \\ -40 \end{bmatrix} - \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 0 \\ -40 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Analisando graficamente o processo, temos a seguinte figura.

Figura 11: Trajetória do algoritmo (1º caso)

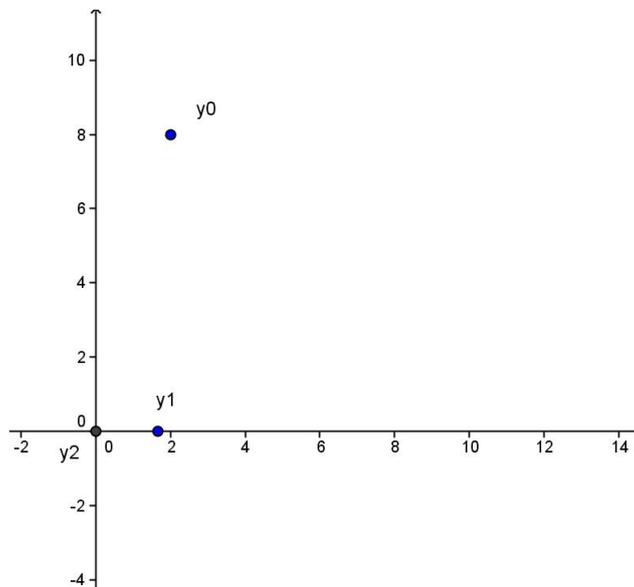


Observe que no primeiro passo, a componente mais próxima em módulo do minimizador $(0,0)$ foi zerada inicialmente. O ponto y^1 se distanciou muito do minimizador. Mas, mesmo assim, na próxima iteração, atingiu o ponto $(0,0)$. Vamos agora verificar o que acontece se iniciarmos o processo com a componente mais distante do minimizador:

$$y^1 = y^0 - \frac{1}{6}Dy^0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 8 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$y^2 = y^1 - \frac{1}{1}Dy^1 = \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Figura 12: Trajetória do algoritmo (2º caso)



Observe que já na primeira iteração o ponto y^1 ficou muito próximo do minimizador.

Partindo deste exemplo, é possível perceber que a ordem em que os autovalores são escolhidos na expressão do algoritmo influencia no seu desempenho. Assim, na próxima seção serão apresentados alguns testes computacionais utilizados nesta investigação.

4 TESTES COMPUTACIONAIS

Neste capítulo trataremos do problema apontado no final do capítulo anterior. Através de testes computacionais, procuramos investigar se a ordem em que os autovalores são escolhidos na expressão do algoritmo influencia no seu desempenho e se há uma ordem que ganhe das outras na maioria dos casos. Apresentaremos o modo como foi programado os testes computacionais e seus resultados.

4.1 Programação dos métodos

Todos os algoritmos foram programados em Matlab v6.1. Antes de programar o método, foi necessário criar um programa que gerava funções quadráticas distintas. A ideia foi utilizar a diagonalização de matrizes simétricas e a fatoração QR .

4.1.1 Programação da matriz definida positiva

Para gerar uma matriz simétrica definida positiva A de ordem n no Matlab, utilizamos o Teorema (2.19). Assim, foi necessário criar uma matriz diagonal com os autovalores de A e uma matriz ortogonal com os autovetores de A .

Dados os autovalores mínimo (m) e máximo (M), queríamos determinar um vetor D cujos elementos estivessem entre m e M . Assim, inicialmente, utilizando o comando "rand", geramos um vetor d com n valores aleatórios variando entre 0 e 1.

Após, programamos o seguinte cálculo:

$$D_i = m + \frac{(d_i - d_{min})}{(d_{max} - d_{min})}(M - m)$$

onde as variáveis d_{min} e d_{max} são respectivamente o menor e o maior valor entre as componentes de d . Observe que

$$0 \leq \frac{(d - d_{min})}{(d_{max} - d_{min})} \leq 1.$$

Sendo assim, quando esta expressão atingir seu maior valor, 1, teremos $D_i = M$. E quando ela atingir seu menor valor, 0, teremos $D_i = m$. Nos testes, foi determinado que $m = 1$ e $M = 100$. Para construir a matriz diagonal de ordem n com os autovalores de A , foi utilizado o comando "*diag(D)*", que gera uma matriz cuja a diagonal principal é preenchida pelos elementos do vetor D e todos os outros elementos são preenchidos por 0.

Para gerar a matriz ortogonal com colunas equivalentes aos autovetores da matriz A , criou-se inicialmente uma matriz $n \times n$ com valores aleatórios e foi utilizado o comando "*[Q, RR] = qr(V)*", que gera uma matriz ortogonal Q e uma matriz triangular superior RR .

Por fim, para gerar a matriz A bastava desenvolver o produto

$$Qdiag(D)Q^T.$$

4.1.2 Programação do Método

Nos testes computacionais, consideramos funções quadráticas $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ da forma

$$g(y) = \frac{1}{2}y^T Dy,$$

pois, como já visto, as propriedades envolvidas na minimização de g são as mesmas que existem na minimização de qualquer função quadrática. Comparamos o algoritmo com quatro variações na escolha da ordem dos autovalores da Hessiana da função e

além destas, o algoritmo com busca linear exata. Elas estão representadas da seguinte maneira:

- SO - sem ordenação dos autovalores.
- AS - ordem crescente dos autovalores.
- DS- ordem decrescente dos autovalores.
- ZM- a cada iteração, procura-se o maior valor absoluto entre as componentes de y e escolhe o autovalor que ocupa a posição correspondente a ele em D .
- Cauchy- busca linear exata.

Na programação desses métodos, utilizamos um produto de vetores que não é definido em Álgebra Linear, mas se assemelha ao produto de matriz diagonal com vetor.

Note que para multiplicar uma matriz diagonal de ordem n por um vetor de \mathbb{R}^n , basta apenas multiplicar cada elemento da diagonal pelo elemento correspondente do vetor. Veja no exemplo:

Exemplo 4.1

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 24 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Se considerarmos a matriz diagonal como um vetor formado apenas pelos elementos da diagonal principal então, o produto do exemplo seria o mesmo que multiplicarmos apenas as componentes correspondentes de cada um dos vetores. Observe

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 24 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

No software Matlab, existe o comando " $*$ " que efetua este tipo de multiplicação entre vetores. Dessa forma, na programação dos algoritmos, com o intuito de armazenar menos dados, foi utilizado apenas o vetor D na expressão da função quadrática, pois multiplicar a matriz $diag(D)$ por um vetor v é o mesmo que $D * v$.

Como o ponto inicial deve ser aleatório, então ele foi gerado novamente pelo comando "rand".

Os critérios de parada são condições impostas para que o método acuse que encontrou um ponto estacionário ou que atingiu o número máximo de iterações. Os critérios utilizados nos algoritmos foram:

- A norma do gradiente menor que 10^{-6} .
- O número máximo de iterações coincidindo com a dimensão n do problema.

Caso a norma do gradiente numa determinada iteração fosse menor que 10^{-6} , então a execução do método seria interrompida e seria indicado o minimizador da função, pois a norma do gradiente estaria próxima de zero ou seria zero. Mas se a execução fosse interrompida devido ao segundo caso, então tínhamos a ocorrência de fracasso na execução.

A programação do método sem ordenação é feita da seguinte maneira:

Algoritmo 4.2 Dado $y^0 \in \mathbb{R}^n$

$$y = y^0$$

$$k = 1$$

Repita

$$y = y - \frac{1}{D(k)} \nabla g(y)$$

$$\nabla g(y) = D * y$$

$$k = k + 1$$

Observe que a cada iteração deve se atualizar o tamanho do passo e o vetor gradiente. Para programar o método com ordem crescente, basta criar um vetor C para armazenar as componentes do vetor D na ordem crescente utilizando o comando "sort".

Algoritmo 4.3 Dado $y^0 \in \mathbb{R}^n$

$$y = y^0$$

$$k = 1$$

$$C = \text{sort}(D)$$

Repita

$$y = y - \frac{1}{C^{(k)}} \nabla g(y)$$

$$\nabla g(y) = D \cdot * y$$

$$k = k + 1$$

O método com a ordem decrescente dos autovalores só difere do método anterior na maneira como são escolhidas as componentes de C . Observe

Algoritmo 4.4 Dado $y^0 \in \mathbb{R}^n$

$$y = y^0$$

$$k = 1$$

$$C = \text{sort}(D)$$

Repita

$$y = y - \frac{1}{C^{(n-k+1)}} \nabla g(y)$$

$$\nabla g(y) = D \cdot * y$$

$$k = k + 1$$

Já no caso ZM, primeiro deve se encontrar o maior valor absoluto entre as componentes de y utilizando o comando "find". Supondo que se encontre mais de uma componente, então o programa escolhe apenas uma delas e utiliza o autovalor que está na posição correspondente em D no algoritmo.

Algoritmo 4.5 Dado $y^0 \in \mathbb{R}^n$

$$y = y^0$$

$$k = 1$$

Repita

$$pmax = find(abs(y) == max(abs(y)))$$

$$j = pmax(1)$$

$$y = y - \frac{1}{D(j)} \nabla g(y)$$

$$\nabla g(y) = D. * y$$

$$k = k + 1$$

A programação do método de Cauchy com busca linear exata é semelhante, mas a cada iteração deve se calcular o tamanho do passo dado pela expressão (3.1).

Algoritmo 4.6 Dado $y^0 \in \mathbb{R}^n$

$$y = y^0$$

$$k = 1$$

Repita

$$\beta^k = \frac{(\nabla g(y))^T \nabla g(y)}{(\nabla g(y))^T * (D. * \nabla g(y))}$$

$$y = y - \beta^k * \nabla g(y)$$

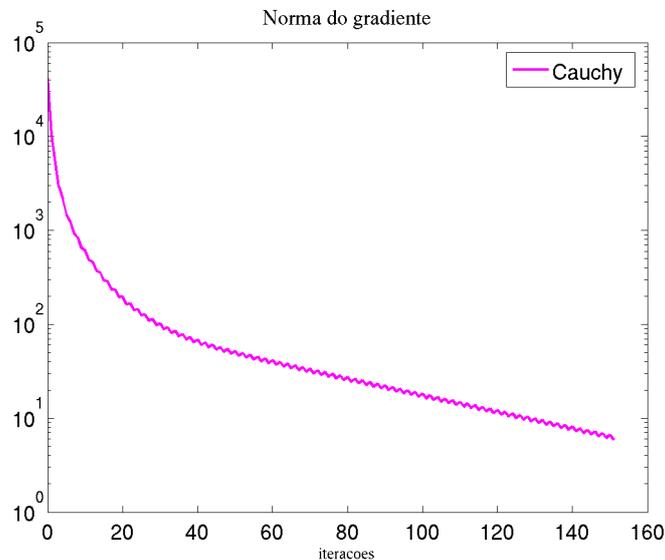
$$\nabla g(y) = D. * y$$

$$k = k + 1$$

Após a programação dos métodos, as iterações são arquivadas e transformadas em gráficos que representam o desempenho do algoritmo para resolver uma função qualquer.

O próximo gráfico ilustra a variação da norma do gradiente de g ao longo das iterações para algoritmo de Cauchy com busca linear exata para minimizar uma quadrática no espaço de dimensão $n = 150$.

Figura 13: Norma do gradiente para busca linear exata



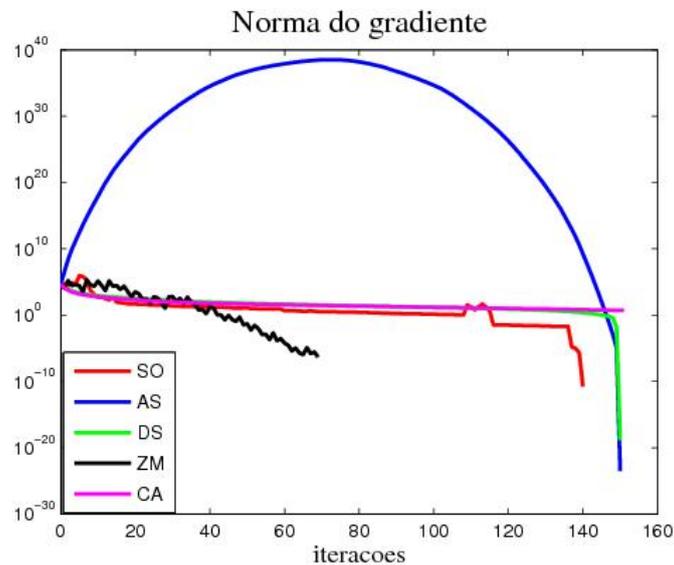
No eixo vertical, os dados representam a norma do gradiente na escala logarítmica e no eixo horizontal, o número de iterações. Observe que embora a norma do gradiente diminua ao longo das iterações, o método de Cauchy não encontrou um ponto estacionário nas 150 iterações consideradas.

4.2 Comparação dos algoritmos

4.2.1 Teste inicial

Nos testes computacionais, tínhamos um interesse em analisar o desempenho do algoritmo ZM em relação aos demais, devido ao fato de que este zerava, primeiramente, as componentes mais distantes do vetor nulo. Comparando os cinco algoritmos em uma mesma função g com domínio tendo dimensão $n = 150$, obtivemos o seguinte gráfico.

Figura 14: Comparação dos algoritmos



Note que o algoritmo ZM minimiza mais rápido que os demais, mas, mesmo assim, todos os outros, exceto o passo calculado como busca linear exata, minimizam a função em no máximo 150 iterações. O algoritmo DS e AS estão praticamente empatados.

No entanto, para poder tirar conclusões mais precisas, é necessário testar os cinco algoritmos em muitos problemas. Para isso, utilizamos um recurso atual chamado Perfil de desempenho.

4.2.2 Perfil de desempenho

As informações que se seguem sobre a explicação do perfil de desempenho foram retiradas das referências (DOLAN; MORÉ, 2002) e (GOMES-RUGGIERO; SAKAMORI, 2005).

Introduzido em 2002 por Dolan e Moré, o perfil de desempenho (performance profile) é uma ferramenta para comparar o desempenho de n_s métodos de um conjunto

S quando aplicado para resolver n_p problemas de um conjunto P , usando algumas medidas como o número de iterações ou o número de avaliações de função.

Seja $m_{s,p}$ a quantidade da medida m que o método s usou para resolver o problema p . A cada problema p e método s temos que se o problema p é resolvido pelo método s então calcula-se a taxa de desempenho

$$r_{s,p} : r_{s,p} = m_{s,p} / \min \{m_{s,p}, \forall s \in S\}.$$

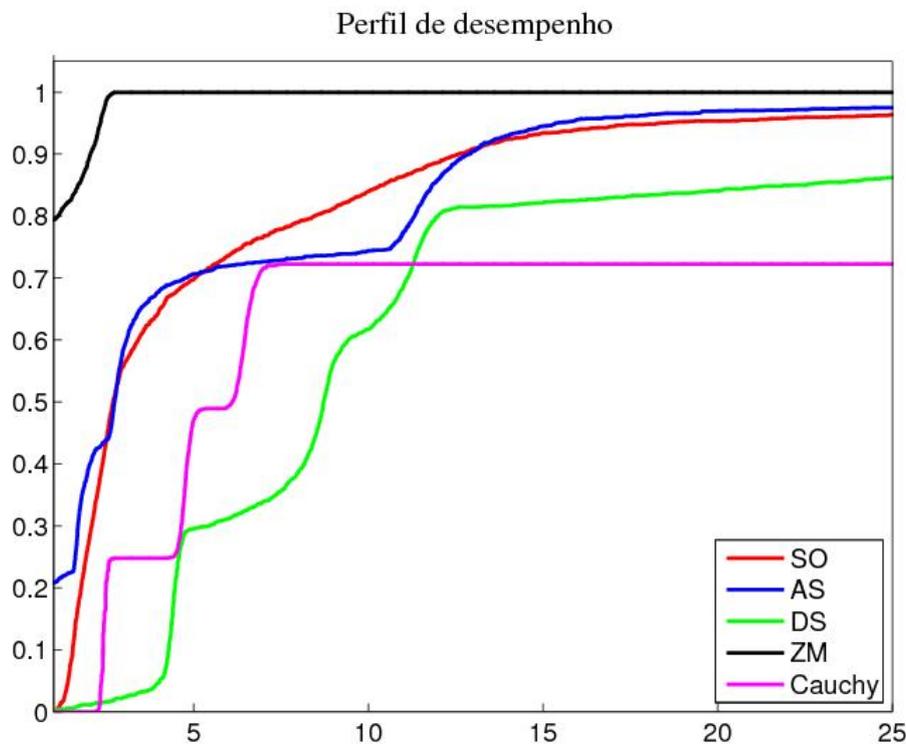
Caso contrário, $r_{s,p} = r_M$ onde r_M é um parâmetro fixado suficientemente grande.

Então, para cada $s \in S$, é construído a função de distribuição acumulada $\rho_s : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, 1]$, para a taxa de desempenho $r_{s,t} : \rho_s(t) = \frac{1}{n_p} \text{card} \{p \in P | r_{s,p} \leq t\}$. Esta função representa o desempenho do método s . Considere \bar{s} o método s que possui o valor máximo para a função $\rho_s(1)$. Assim, este método pode resolver o maior número de problemas usando o menor número da medida m . Já a eficiência do método s em termos do número de problemas que foram resolvidos é avaliada pelo menor valor de t , denotado por \bar{t}_s , tal que $\rho_s(\bar{t}_s) = 1$, se existe tal valor para $t < r_M$. Portanto, o melhor método em termos de eficiência será o método s^* para o qual $t_{s^*} = \min \{t_s, \forall s \in S\}$.

Dessa forma, a figura 15 retrata o perfil de desempenho dos algoritmos testados. A medida analisada é o número de iterações e foram resolvidos 2000 problemas com n variando de 10 a 10000.

No eixo vertical, está representado a porcentagem de problemas resolvidos. Já no eixo horizontal está representado o número de vezes o menor número de iterações.

Figura 15: Perfil de desempenho



Uma interpretação que se pode tirar é que o algoritmo AS resolve mais de 70% dos problemas gastando não mais que 5 vezes o menor número de iterações.

Observe que ZM ganha dos outros algoritmos em mais de 80% dos problemas e AS em mais de 20% dos problemas. Ou seja, a soma é maior do que 100%. Isso ocorre porque quando dois algoritmos empatam no número de iterações, o problema é contado tanto para um quanto para o outro.

Pode se notar que ZM resolve todos os problemas usando não mais que o dobro do menor número de iterações e para resolver 90% dos problemas, AS pode gastar até 13 vezes o número mínimo de iterações. Permitindo gastar até 25 vezes o número de iterações do melhor algoritmo, Cauchy resolve não mais que 70 % dos problemas.

Além destas interpretações, temos também que quanto mais à direita o algo-

ritmo está representado no gráfico, pior é seu desempenho. Assim, podemos concluir que ZM possui o melhor desempenho e DS possui o pior.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, utilizamos alguns tópicos de Álgebra Linear que enriqueceram a argumentação das teorias envolvidas no desenvolvimento do método iterativo estudado, sendo, dessa forma, um exemplo da aplicação de diagonalização de matrizes na área de Otimização.

Com o intuito de minimizar funções quadráticas, apresentamos inicialmente o método de Cauchy com busca linear exata, e devido ao trajetória de "zigue-zague" do algoritmo, trabalhamos com uma proposta nova, escolhendo como tamanho do passo, a cada iteração, o inverso de um autovalor da Hessiana da função.

Antes de analisar as propriedades do método, fizemos uma mudança de variável que possibilitou a troca da matriz Hessiana da função pela matriz diagonal correspondente. Dessa forma, as demonstrações e notações envolvidas ficaram simples, além de que, para os testes computacionais, bastava armazenar apenas os autovalores da Hessiana (elemento da matriz diagonal), ocupando menos espaço na memória do computador.

Considerando uma função quadrática com Hessiana definida positiva e domínio \mathbb{R}^n , então provamos que o novo método minimiza esta função em no máximo n iterações. Além do que, se a Hessiana possui autovalores repetidos, então, o método minimiza em menos de n iterações.

Apesar de seu comportamento destacável em relação ao método de Cauchy com busca linear exata, temos consciência de que seu desempenho depende da eficiência em se calcular os autovalores de uma matriz, podendo assim, o segundo se sobressair

em relação ao primeiro em alguns casos.

Percebemos com exemplos que a ordem em que os autovalores são escolhidos influencia no desempenho do algoritmo. Através de testes computacionais, foi verificado que utilizando a ordem decrescente dos autovalores obtemos o pior desempenho. Nosso palpite é que isso ocorre porque o processo inicia com autovalores grandes, ou seja, passos pequenos, deixando para o final os maiores passos.

O algoritmo que possuiu melhor desempenho é o que zera inicialmente as componentes mais distantes do minimizador da função. Acreditamos que este algoritmo, em particular, é ótimo e que a cada iteração, o ponto inicial se aproxima mais do minimizador. Pretendemos demonstrar esta ideia em um futuro trabalho.

Referências

- BOULOS, P.; CAMARGO, I. de. *Geometria Analítica - um tratamento vetorial*. 3rd. ed. São Paulo: Prentice Hall, 2005.
- DOLAN, E. D.; MORÉ, J. J. Benchmarking optimization software with performance profiles. *Mathematical Programming*, v. 91, p. 201–213, 2002.
- GOMES-RUGGIERO, M.; SAKAMORI, M. Variações do método de máxima descida em otimização irrestrita. *TEMA Tend. Mat. Apl. Comp.*, v. 6, n. 2, p. 285–294, 2005.
- HILL, D. R.; KOLMAN, B. *Introdução à Álgebra Linear com aplicações*. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- H.L.GUIDORIZZI. *Um curso de cálculo 2*. 5nd. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
- LEON, S. J. *Álgebra Linear com Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC, 1999.
- LI, F.; WANG, H. Local n-step quadratic convergence of the gradient method for minimizing non-quadratic functions in unconstrained optimization. 2001.
- LIMA, E. L. *Álgebra Linear*. Rio de Janeiro: IMPA, 2006.
- POOLE, D. *Álgebra Linear*. São Paulo: Thomson Learning, 2006.
- SANTOS, S.; XAVIER, L. Estudo do desempenho de variações do método de Cauchy para minimização irrestrita. *TEMA Tend. Mat. Apl. Comp.*, v. 6, n. 1, p. 141–151, 2005.