

**Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
Departamento de Ciências Exatas e Tecnologias**

Licenciatura em Matemática

Alan Sousa França

**UM ESTUDO DO MÉTODO DE NEWTON
COM APLICAÇÕES EM
ROBÓTICA E PROCESSAMENTO DE IMAGENS**

ADPLENAM VITAM

Vitória da Conquista

2020

Alan Sousa França

UM ESTUDO DO MÉTODO DE NEWTON
COM APLICAÇÕES EM
ROBÓTICA E PROCESSAMENTO DE IMAGENS

Monografia apresentada ao Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia - Campus Vitória da Conquista-BA, para obtenção do Título de Licenciado em Matemática, sob orientação do Prof. Dr. Teles Araújo Fernandes.

Vitória da Conquista
2020

Alan Sousa França

UM ESTUDO DO MÉTODO DE NEWTON
COM APLICAÇÕES EM
ROBÓTICA E PROCESSAMENTO DE IMAGENS

Monografia apresentada ao Colegiado do Curso de Matemática como requisito parcial para aprovação na disciplina Seminário de Pesquisa II do Curso de Licenciatura em Matemática.

Trabalho aprovado em 27 de Outubro de 2020.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Teles Araújo Fernandes -
UESB
Orientador

Prof. Dr. Marcio Antônio de Andrade
Bortoloti - UESB
Coorientador

Prof. Dr. Flaulles Boone Bergamaschi
- UESB
Convidado

Prof. Dr. Orizon Pereira Ferreira -
UFG
Convidado

Vitória da Conquista

2020

Agradecimentos

Agradeço imensamente a Deus pela força e sustento que me permitiu vencer cada etapa do curso.

A toda a minha família por ser parte principal em minha caminhada, em especial a minha mãe Luciana, sempre apostando tudo em mim, também a minha irmã Jaine e o meu padrasto Davi.

Aos meus colegas e amigos que tornaram essa jornada única e inesquecível, em especial Lucas, Lorrane, Josué, Arlete, Salustiano e todos meus colegas de turma.

Aos meus orientadores, os professores Teles e Marcio pelos ensinamentos e disposição que foram cruciais na escrita deste trabalho.

A UESB pelo apoio financeiro por meio dos programas de permanência estudantil e bolsas meritórias.

Resumo

O propósito deste trabalho é estudar a convergência com taxa superlinear/quadrática do método de Newton para encontrar raiz de função definida no espaço euclidiano n -dimensional. A fim de constatar a eficiência do método de Newton, nós o aplicamos para resolver dois problemas, a saber, minimizar o Quociente de Rayleigh na esfera e uma função definida no cone de matrizes simétricas e definidas positivas - SDP. O primeiro caso tem aplicações em processamento de imagens, enquanto o segundo é um modelo matemático relacionado a sensibilidade da mão de um robô. Neste segundo caso, determinamos uma classe de matrizes no cone SDP em que o problema pode ser resolvido por meio de otimização irrestrita. Apesar de ser esperado que o método de Newton tenha uma performance superior ao método do Gradiente, realizamos experimentos numéricos utilizando os dois métodos para resolver os problemas mencionados, com o objetivo de ilustrar o comportamento do método de Newton.

Palavras-chave: Método de Newton. Taxa de convergência. Otimização. Quociente de Rayleigh. Robótica. Performance numérica.

Abstract

In order to find a zero of a function defined on the n -dimensional Euclidian space, we study the convergence with super linear/quadratic rates of Newton method. Besides, we have applied this method to solve two problems, namely, to minimize the Rayleigh Quotient on the sphere, and a function defined on the cone of symmetric positive definite matrices – SPD. The first one, has application in image processing. The second one is a mathematical model related to sensibility of hand robot. On this last one, we present a subset of matrices on the SPD which the Newton method can be applied. We know that the Newton method performs better than the Gradient method, despite that numerical experiments have been performed using both methods to solve the mentioned problems, in order to illustrate the behavior of the Newton method.

Keywords: Newton method; Rate of convergence; Optimization; Rayleigh Quotiente; Robotic; Numerical performance.

Sumário

Introdução	8
1 Aplicações Diferenciáveis	10
1.1 A norma de uma transformação linear	10
1.2 Diferenciabilidade de uma aplicação	14
1.3 Teorema da Aplicação Inversa	19
2 Método de Newton	25
2.1 O método de Newton para equações	25
2.2 Análise de Convergência	28
3 Aplicações	35
3.1 Introdução à Otimização	35
3.2 Quociente de Rayleigh na esfera unitária	39
3.3 Sensibilidade da mão de um robô	44
4 Experimentos Numéricos	49
4.1 Quociente de Rayleigh na esfera unitária	49
4.2 Sensibilidade da mão de um robô.	51
5 Considerações Finais	53
Referências	54
Apêndice A Implementações	56
A.1 Método de Newton	56
A.2 Método do Gradiente	60

Introdução

Resolver equações é um dos problemas mais antigos da Matemática. É possível afirmar que para uma equação polinomial de grau 1 ou 2 são conhecidos métodos de resolução desde 200 a.c, dentre esses podemos destacar a fórmula de Bhaskara, um método de resolução da equação polinomial do segundo grau bastante conhecida no Ensino Médio. Muito tempo depois, em 1545 graças ao esforço de matemáticos como S. del Ferro, N. Tartaglia, G. Cardano, L. Ferrari, entre outros, as equações algébricas cúbicas e quárticas tiveram suas fórmulas de resoluções estabelecidas. Em resumo, para um polinômio $f(x)$ de grau $1 \leq n \leq 4$ os matemáticos encontraram fórmulas para as raízes de $f(x)$ em função de seus coeficientes. Essas raízes são descritas por operações algébricas fundamentais e extração de raízes quadradas, cúbicas, etc, a isso chamamos de *resolução por radicais* da equação $f(x) = 0$. Ao buscar solução por radicais para uma equação polinomial de grau 5 surgiram os trabalhos de Galois, período em que muitos consideram como o surgimento da teoria de grupos. Galois, um dos matemáticos mais brilhantes da história, concluiu que em geral a equação $f(x) = 0$ em que $f(x)$ tem grau $n \geq 5$ não pode ser resolvida por radicais. Recomendamos [1] para o leitor interessado na resolução de equações por meio de radicais. Dessa forma, como podemos resolver a equação $f(x) = 0$ quando o grau de $f(x)$ é maior ou igual a 5? ou no caso em que $f(x)$ é uma função, não necessariamente linear? Cerca de 100 anos depois alguns matemáticos se voltaram para uma abordagem muito diferente daquela de encontrar soluções por radicais de uma equação polinomial, dando início ao desenvolvimento dos métodos numéricos, ver [2]. Segundo [3] a maioria dos problemas reais são, em geral, complexos e envolvem fenômenos não lineares. Quando aplicado em equações, os métodos numéricos, por meio de um processo iterativo, determinam uma sequência de valores aproximados de uma determinada raiz, permitindo obter raízes com qualquer ordem de aproximação desejada. Essa solução aproximada, também é conhecida como solução numérica. Ainda segundo [3] um modelo matemático, pode ser em geral, demasiadamente complexo para ser tratado analiticamente. Nesse caso deve-se construir modelos mais simplificados ou obter soluções aproximadas. Dessa forma, muitos modelos matemáticos usam os métodos numéricos para a obtenção de soluções numéricas para problemas reais.

O método de Newton (também conhecido por método de Newton-Raphson) é

talvez o método numérico mais conhecido para aproximar uma raiz de uma função real definida em um intervalo da reta [4, 5, 6]. Este foi um dos motivos que nos levou a estudar a teoria de convergência do método de Newton para resolver um sistema de equações. Originalmente, o método de Newton apenas se aplicava a polinômios. Uma generalização do método para sistemas de equações não lineares foi proposta por Thomas Simpson em 1740, veja [7, 8, 5, 9].

Neste trabalho, analisamos a convergência do método de Newton para resolver equações não lineares. O resultado principal nos diz que a solução para o qual o método converge depende da boa escolha do ponto inicial e quando converge, possui uma taxa de convergência superlinear ou quadrática. Ademais, aplicamos o método de Newton para resolver um problema matemático de autovetor ao minimizar o quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária. Entre algumas aplicações desse problema podemos destacar uma em processamento de imagens com relação à economizar armazenamento de dados, como pode ser visto em [10]. Como segunda aplicação, também analisamos o método de Newton para minimizar uma família de funções definidas no cone de matrizes simétricas e definidas positivas - SDP. Essas funções estão associadas ao problema *Dextrous hand grasping force optimization*, veja [11, 12]. Em relação ao último problema, apresentamos um novo resultado que mostra ser possível utilizar o método de Newton para minimizar uma determinada função sobre o cone, de forma irrestrita sem utilizar projeções ou estrutura diferencial em variedades não lineares. Para isso, mostraremos que o cone SDP é um conjunto aberto no subespaço das matrizes simétricas.

O texto está dividido em 5 capítulos. O Capítulo 1 contém alguns conceitos de análise no \mathbb{R}^n que serão utilizados no decorrer do trabalho. Explicamos no Capítulo 2 o método de Newton para resolver equações não lineares, o objetivo principal é apresentar uma análise de convergência para o método de Newton. No capítulo 3, aplicamos o método de Newton no problema de minimizar a função Quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária, como também no problema *Dextrous hand grasping force optimization* sobre o cone SDP. A fim de constatar a eficiência do método de Newton, nós implementamos todos os algoritmos que foram propostos e em seguida realizamos experimentos numéricos que serão apresentados no Capítulo 4. No Capítulo 5 apontamos nossas considerações e perspectivas futuras a respeito deste trabalho.

Capítulo 1

Aplicações Diferenciáveis

O estudo de teoremas clássicos do cálculo diferencial é de grande importância para este trabalho, pois fundamenta todos os resultados que veremos a partir do Capítulo 2. Assim, neste capítulo faremos um estudo elementar dos principais resultados do Cálculo Diferencial desde a noção de diferenciabilidade até o importante Teorema da Aplicação Inversa. Para isso, é importante que o leitor conheça alguns fatos básicos da topologia métrica do espaço euclidiano \mathbb{R}^n , como o conceito de produto interno e norma, conjuntos abertos, conjuntos fechados, conjuntos compactos e aplicações contínuas, esses conceitos poderão ser encontrados em [13, cap. 1].

Dividimos este capítulo em três seções, na primeira vamos mostrar que o espaço vetorial das transformações lineares também é um espaço normado e conseqüentemente um espaço métrico. Na segunda seção estenderemos a noção de diferenciabilidade, como conhecemos, para as aplicações definidas em espaços euclidianos, já na última seção abordamos o estudo de alguns dos teoremas clássicos como o Teorema da Aplicação Inversa e o Teorema da Aplicação Implícita.

1.1 A norma de uma transformação linear

É de grande importância na Álgebra Linear o estudo de transformações lineares. Como bem sabemos, estas são um tipo especial de funções que preservam as propriedades de um espaço vetorial. Quando o domínio e o contradomínio de uma transformação linear são espaços vetoriais de dimensão finita conseguimos um isomorfismo entre o espaço das transformações lineares definidas nestes espaços com o espaço das matrizes, permitindo que identifiquemos, em diversas vezes, uma transformação linear como uma matriz e vice-versa. Além disso, também iremos necessitar obter propriedades topológicas do espaço vetorial das transformações lineares, o que nos leva à definir uma norma nesse espaço.

Uma *transformação linear* $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ é uma aplicação que associa a cada vetor $v \in \mathbb{R}^n$ um vetor $A \cdot v = A(v) \in \mathbb{R}^m$ de modo que, para quaisquer $u, v \in \mathbb{R}^n$ e $\alpha \in \mathbb{R}$,

valem as relações:

$$A(u + v) = A \cdot u + A \cdot v,$$

$$A(\alpha v) = \alpha A \cdot v.$$

É imediato que se $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ é uma transformação linear então $A \cdot 0 = 0$ e dados $v_1, \dots, v_n \in \mathbb{R}^n$ e $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$, vale

$$A(\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n) = \alpha_1 A \cdot v_1 + \dots + \alpha_n A \cdot v_n.$$

Definimos a *soma* de duas transformações lineares $A, B : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e o *produto* de A por um escalar $\alpha \in \mathbb{R}$ como sendo as transformações lineares $A + B : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $\alpha A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ definidas por $(A + B) \cdot v = A \cdot v + B \cdot v$ e $(\alpha A) \cdot v = \alpha A \cdot v$, para todo $v \in \mathbb{R}^n$. Essas definições tornam o conjunto de todas as transformações lineares $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, denotado por $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$, um espaço vetorial. Chamamos de *isomorfismo* uma aplicação linear $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ que é bijetora. Um resultado muito importante da Álgebra linear nos diz que fixando as bases canônicas de \mathbb{R}^n e \mathbb{R}^m é possível encontrar um isomorfismo entre $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ e o conjunto $\mathcal{M}(m \times n)$ das matrizes reais com m linhas e n colunas.

Exemplo 1.1.1. A aplicação $R : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por $R(x, y) = (x \cos \theta - y \sin \theta, x \sin \theta + y \cos \theta)$, onde $0 < \theta < 2\pi$ é uma transformação linear. Basta observar que as coordenadas de $R(x, y)$ são dadas por combinações lineares de x e y . Essa transformação leva cada vetor v do plano no vetor $R \cdot v$ que dele resulta pela rotação de ângulo θ , no sentido anti-horário, em torno da origem. A matriz de R relativa à base canônica de \mathbb{R}^2 é

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Uma *norma* em um espaço vetorial real \mathbf{V} é uma função real $\|\cdot\| : \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{R}$ que, para quaisquer $x, y \in \mathbf{V}$ e $\alpha \in \mathbb{R}$, cumpre as seguintes condições:

- A1. $x \neq 0 \Rightarrow \|x\| > 0$;
- A2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, onde $|\alpha|$ é o valor absoluto de α ;
- A3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (desigualdade triangular).

Exemplo 1.1.2. Dado $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, as funções $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definidas por

$$\begin{aligned} \|x\|_E &= \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}, & (\text{Norma euclidiana}) \\ \|x\|_M &= \max\{|x_1|, \dots, |x_n|\}, & (\text{Norma do máximo}) \\ \|x\|_S &= |x_1| + \dots + |x_n|, & (\text{Norma da soma}) \end{aligned}$$

são normas usuais em \mathbb{R}^n .

Duas normas arbitrárias $\|\cdot\|_1$ e $\|\cdot\|_2$ em \mathbf{V} são *equivalentes* quando existirem constantes $a, b > 0$ tais que $\|x\|_1 \leq a\|x\|_2$ e $\|x\|_2 \leq b\|x\|_1$ para todo $x \in \mathbf{V}$. Quando $\mathbf{V} = \mathbb{R}^n$ temos um importante teorema que poderá ser encontrado em [13, Teorema 8, p. 19], em que garante que duas normas quaisquer em espaços de dimensão finita são equivalentes.

Fixemos arbitrariamente uma norma $\|\cdot\|_1$ em \mathbb{R}^n e $\|\cdot\|_2$ uma norma em \mathbb{R}^m e seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}^m$ uma aplicação definida no conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$, dizemos que f é *contínua* no ponto $a \in X$ quando, para qualquer $\epsilon > 0$ dado, conseguimos encontrar $\delta > 0$ tal que se $x \in X$ e $\|x - a\|_1 < \delta$ então $\|f(x) - f(a)\|_2 < \epsilon$. Se $f : X \rightarrow \mathbb{R}^m$ é contínua em todos os pontos do conjunto X , diz-se que f é uma aplicação *contínua*. Uma observação importante é que se usarmos a equivalência de duas quaisquer normas em \mathbb{R}^n é imediato ver que a continuidade (ou a não-continuidade) de f em um ponto continua válida se alterarmos as normas fixadas. A próxima definição será útil para darmos exemplos de funções contínuas, dizemos que uma aplicação $f : X \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida no conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$, é *Lipschitziana* quando existe $L > 0$ (constante de Lipschitz de f) tal que, para quaisquer $x, y \in X \Rightarrow \|f(x) - f(y)\|_2 \leq L\|x - y\|_1$. Em particular, quando $0 \leq L < 1$ dizemos que f é uma *contração*. Segue que dado $\epsilon > 0$, se tomarmos $\delta = \epsilon/k$ veremos facilmente que toda aplicação Lipschitziana é contínua. O exemplo a seguir nos dará uma infinidade de funções contínuas.

Exemplo 1.1.3. Toda transformação linear $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ é Lipschitziana, para ver isso, tome $L = \max\{\|A \cdot e_1\|_2, \dots, \|A \cdot e_n\|_2\}$, onde e_i é o i -ésimo vetor da base canônica de \mathbb{R}^n . Então, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, $x = x_1e_1 + \dots + x_n e_n$ temos

$$\|A \cdot x\|_2 = \|A(\sum x_i e_i)\|_2 = \|\sum x_i A \cdot e_i\|_2 \leq \sum |x_i| \|A \cdot e_i\|_2 \leq L \sum |x_i|. \quad (1.1)$$

Como duas normas quaisquer são equivalentes em \mathbb{R}^n , não há perda de generalidade em escolhermos $\|x\|_1 = \|x\|_S$ definida no Exemplo 1.1.2. Usando (1.1) tem-se

$$\|A \cdot x\|_2 \leq L\|x\|_1, \quad (1.2)$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$. Então, para $x, y \in \mathbb{R}^n$ arbitrários, vale que $\|A \cdot x - A \cdot y\|_2 = \|A(x - y)\|_2 \leq L\|x - y\|_1$, donde segue o resultado. Em particular, a transformação linear A é contínua.

A partir de agora, vamos omitir os índices para diferenciar as normas escolhidas em \mathbb{R}^n ou \mathbb{R}^m , o leitor conseguirá identificar a diferença pelo contexto. Definimos uma função real $\|\cdot\|$ no espaço vetorial $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$, pondo para cada $A \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$

$$\|A\| = \sup\{\|A \cdot x\|, x \in \mathbb{R}^n, \|x\| = 1\}. \quad (1.3)$$

Veja que o supremo em (1.3) está bem definido, pois se nos restringimos aos vetores unitários de \mathbb{R}^n , podemos usar (1.2) e verificar que $x \in \mathbb{R}^n$ e $\|x\| = 1 \Rightarrow \|A \cdot x\| \leq L$,

isto é, A transforma a esfera unitária de \mathbb{R}^n em um subconjunto limitado de \mathbb{R}^m . O leitor atento deve ter percebido que também poderíamos ter utilizado o fato da esfera unitária ser um subconjunto compacto, logo é transformada pela aplicação contínua A em um subconjunto também compacto, que em particular é limitado (veremos esse resultado no cap. 3). Verifiquemos a seguir que a função $A \mapsto \|A\| \in \mathbb{R}$ cumpre os axiomas exigidos para ser uma norma, onde $A, B \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ e $\alpha \in \mathbb{R}$.

- A1. Se $A \neq 0$, existe $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo, tal que $A \cdot x \neq 0$, então $\|A(x/\|x\|)\| > 0$, logo usando a definição de supremo segue que $\|A\| > 0$.
- A2. Considere $x \in \mathbb{R}^n$ com $\|x\| = 1$, então $\|\alpha A\| = \sup\{\|\alpha A \cdot x\|\} = \sup\{|\alpha| \|A \cdot x\|\} = |\alpha| \sup\{\|A \cdot x\|\} = |\alpha| \|A\|$.
- A3. (desigualdade triangular) Considere $x \in \mathbb{R}^n$ com $\|x\| = 1$, então $\|A+B\| = \sup\{\|(A+B) \cdot x\|\} = \sup\{\|A \cdot x + B \cdot x\|\} \leq \sup\{\|A \cdot x\| + \|B \cdot x\|\} = \sup\{\|A \cdot x\|\} + \sup\{\|B \cdot x\|\} = \|A\| + \|B\|$.

Vamos mostrar também que essa norma cumpre as seguintes propriedades:

- P1. $\|A \cdot x\| \leq \|A\| \|x\|$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$;
- Dado $x \in \mathbb{R}^n$ não nulo, pela própria definição $\|A(x/\|x\|)\| \leq \|A\|$, donde segue trivialmente o resultado.
- P2. $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$, se $A \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ e $B \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^k; \mathbb{R}^n)$.
- $\|AB \cdot x\| = \|A(B \cdot x)\|$ e usando P1, tem-se $\|AB \cdot x\| \leq \|A\| \|B \cdot x\| \leq \|A\| \|B\| \|x\|$, o resultado segue fazendo $\|x\| = 1$ e tomando o supremo.
- P3. $\|I\| = 1$, onde $I \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^n)$ é a identidade.
- Com efeito, $\|I \cdot x\| = \|x\|$.

Em P2 a norma em \mathbb{R}^n deve ser tomada a mesma, tanto no espaço $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ quanto em $\mathcal{L}(\mathbb{R}^k; \mathbb{R}^n)$. Lembrando que a cada transformação linear $A \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ podemos associar a sua matriz $a \in \mathcal{M}(m \times n)$ em relação às bases canônicas de \mathbb{R}^m e \mathbb{R}^n . Além disso, cada matriz real $m \times n$ pode ser considerada como um ponto do espaço euclidiano \mathbb{R}^{mn} , basta escrevermos as colunas, um após a outra, como um único vetor linha. Portanto, sempre que for conveniente identificaremos $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m) = \mathcal{M}(m \times n) = \mathbb{R}^{mn}$ e usaremos sem perda de generalidade a norma definida em 1.3. A seguir, vamos utilizar a norma de uma transformação linear para demonstrar uma importante propriedade dos isomorfismos.

Exemplo 1.1.4. Todo isomorfismo $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ transforma abertos de \mathbb{R}^n em abertos de \mathbb{R}^n . Para ver isso, seja $U \subset \mathbb{R}^n$ um subconjunto aberto. Dado $y \in T(U)$, queremos exibir

$r > 0$ de modo que $B(y, r)$, a bola aberta de centro em y e raio r , é tal que $B(y, r) \subset T(U)$. Temos que $x = T^{-1}(y) \in U$ e como U é aberto, existe $\delta > 0$ tal que $B(x, \delta) \subset U$. Tome $r = \delta/\|T^{-1}\|$ e seja $b \in B(y, r)$, fazendo $b = T(a)$, temos

$$\begin{aligned}\|a - x\| &= \|T^{-1}(b) - T^{-1}(y)\| = \|T^{-1}(b - y)\| \\ &\leq \|T^{-1}\| \|b - y\| \leq \|T^{-1}\| r = \delta,\end{aligned}$$

donde segue que $a \in B(x, \delta) \subset U$. Portanto, $b = T(a) \in T(U)$.

Na próxima seção veremos um importante exemplo de transformação linear que será chamada de derivada, o que justifica a necessidade em se obter propriedades topológicas de $\mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$.

1.2 Diferenciabilidade de uma aplicação

Vamos estender para as aplicações definidas em espaços euclidianos a noção de uma função derivável na reta. Uma maneira natural é relacionar a diferenciabilidade com a existência de uma determinada transformação linear que deverá cumprir um papel análogo ao da derivada como conhecemos.

Considere uma função real $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ definida em um aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ e sejam $a \in U$ e $v \in \mathbb{R}^n$. A *derivada direcional* de f no ponto a na direção de v , é por definição, o limite

$$\frac{\partial f}{\partial v}(a) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t},$$

quando tal limite existe. Em particular, a derivada direcional na direção de e_i é chamada de *i -ésima derivada parcial* e denotamos por

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = \frac{\partial f}{\partial e_i}(a).$$

Seja agora $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ uma aplicação definida num aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. A *derivada direcional* de f no ponto $a \in U$ na direção de $v \in \mathbb{R}^n$ é o vetor

$$\frac{\partial f}{\partial v}(a) = \left(\frac{\partial f_1}{\partial v}(a), \dots, \frac{\partial f_m}{\partial v}(a) \right) \in \mathbb{R}^m,$$

onde $f_1, \dots, f_m : U \rightarrow \mathbb{R}$ são as funções coordenadas de f .

As definições anteriores são com certeza um caminho natural para se chegar em uma noção de derivada que tenha propriedades análogas às da derivada de uma função real definida em um intervalo da reta. Pela definição, o cálculo prático da i -ésima derivada parcial se faz considerando todas as variáveis como se fossem constantes, exceto a i -ésima, que neste caso podemos aplicar as regras usais de derivação. Entretanto, como veremos no exemplo a seguir, a existência de todas as derivadas parciais num ponto não implica a continuidade da função nesse ponto.

Exemplo 1.2.1. Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x, y) = xy/(x^2 + y^2)$ se $x^2 + y^2 \neq 0$ e $f(0, 0) = 0$. Dado um vetor $z = (x, y)$ qualquer e não nulo, usando as regras usuais de derivação tem-se

$$\frac{\partial f}{\partial x}(z) = \frac{y^3 - x^2y}{(x^2 + y^2)^2} \quad \text{e} \quad \frac{\partial f}{\partial y}(z) = \frac{x^3 - xy^2}{(x^2 + y^2)^2}.$$

Quando $z = (0, 0)$

$$\frac{\partial f}{\partial x}(z) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t, 0) - f(0, 0)}{t} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial f}{\partial y}(z) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(0, t) - f(0, 0)}{t} = 0.$$

Assim, f possui derivadas parciais em todos os pontos do plano. Contudo, f não é contínua na origem, pois se considerarmos $u = (\alpha, \beta)$, teremos que $\lim_{t \rightarrow 0} f(t\alpha, t\beta) = \alpha\beta/(\alpha^2 + \beta^2)$, como este limite varia com α e β , segue daí que não existe $\lim_{(x,y) \rightarrow (0,0)} f(x, y)$.

Vamos agora definir o conceito de diferenciabilidade, em que implicará a continuidade da função e a existência da derivada direcional em todas as direções. Uma aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, é dita *diferenciável* no ponto $a \in U$ se existir uma transformação linear $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ tal que, para todo $v \in \mathbb{R}^n$ com $a + v \in U$, tem-se $f(a + v) - f(a) = T \cdot v + \|v\|\eta(v)$, onde $\lim_{v \rightarrow 0} \eta(v) = 0$. Observe que se f é diferenciável em $a \in U$, então $\lim_{v \rightarrow 0} f(a + v) = \lim_{v \rightarrow 0} (f(a) + T \cdot v + \|v\|\eta(v)) = f(a)$, onde utilizamos a continuidade da transformação linear T e o fato de que $\lim_{v \rightarrow 0} \|v\|\eta(v) = 0$. Isso mostra que a diferenciabilidade de uma função num ponto implica a continuidade nesse ponto. Além disso, para todo $v \in \mathbb{R}^m$ e qualquer $t \in \mathbb{R}$ suficientemente pequeno, teremos $f(a + tv) - f(a) = T \cdot tv + \|tv\|\eta(tv)$, com $\lim_{v \rightarrow 0} \eta(tv) = 0$. Como $T \cdot tv = tT \cdot v$ e $\|tv\| = |t|\|v\|$, para $t \neq 0$, segue que

$$\frac{f(a + tv) - f(a)}{t} = T \cdot v \pm \|v\|\eta(tv), \quad (1.4)$$

implicando que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t} = T \cdot v. \quad (1.5)$$

Portanto, $T \cdot v = \frac{\partial f}{\partial v}(a)$, donde segue que a transformação linear T é única, sendo chamada de a derivada de f no ponto a e representamos por $df(a)$.

Observação 1.2.1. Decorre diretamente de (1.4) que a aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ é diferenciável no ponto $a \in U$ se, e somente se, cada uma das suas funções coordenadas $f_1, \dots, f_m : U \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável nesse ponto.

A matriz que representa a transformação linear $df(a)$ nas bases canônicas de \mathbb{R}^n e \mathbb{R}^m será chamada de *matriz jacobiana* de f no ponto a , e denotamos por $f'(a)$. Usando (1.5) vemos que

$$f'(a) \cdot e_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_i}(a), \dots, \frac{\partial f_m}{\partial x_i}(a) \right),$$

donde

$$f'(a) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(a) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(a) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(a) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(a) \end{bmatrix},$$

onde $f_1, \dots, f_m : U \rightarrow \mathbb{R}$ são as funções coordenadas de f . Quando a aplicação f é uma função real, isto é, $m = 1$, denotamos $f'(a)$ por $\nabla f(a)$ e chamamos de *vetor gradiente* da função f no ponto a . Assim, para todo $v \in \mathbb{R}^n$, temos $df(x) \cdot v = \nabla f(x)^T v$, onde $\nabla f(x)^T$ denota o vetor transporte do gradiente de f em x , de modo que $\nabla f(x)^T v$ é o produto interno canônico entre os vetores $\nabla f(x)$ e v . Uma aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ diz-se *diferenciável* no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ quando é diferenciável em todos os pontos de U , neste caso, fica definido a aplicação derivada $df : U \rightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m) = \mathbb{R}^{mn}$, que associa a cada ponto $x \in U$ a transformação linear $df(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Teorema 1.2.1. *Se uma função $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ possui derivadas parciais em todos os pontos do aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ e cada uma delas é contínua em todos os pontos de U , então f é diferenciável em U .*

Demonstração. Para o caso $n = 2$ veja uma demonstração em [13, Teorema 1, p. 133]. O caso geral se trata de modo análogo. \square

Uma aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ é de *classe C^1* no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, e escreve-se $f \in C^1$, quando f é diferenciável e a aplicação derivada df é contínua. Resulta do Teorema 1.2.1 e da observação 1.2.1 que f é de classe C^1 se, e somente se, cada uma das suas funções coordenadas $f_1, \dots, f_m : U \rightarrow \mathbb{R}$ possui derivadas parciais contínuas em todos os pontos de U . Mais geralmente, dado $k \in \mathbb{N}$, $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ é de *classe C^k* no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ quando é diferenciável e sua derivada, df , é uma aplicação de classe C^{k-1} . No caso particular de uma função real de classe C^2 a *segunda derivada* de f no ponto a é $\Psi'(a)$ onde $\Psi = \nabla f$, também representamos por $\nabla^2 f(a)$ e chamamos de *Hessiana* de f em a . Veremos a seguir alguns exemplos de funções diferenciáveis.

Exemplo 1.2.2. Considere $A \in \mathbb{R}^{n^2}$ e defina $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, dada por $f(x) = \langle x, A \cdot x \rangle$, vamos mostrar que f é diferenciável. Usando as propriedades do produto interno e definição de matriz transposta, temos que

$$\begin{aligned} f(x+v) &= \langle x+v, A(x+v) \rangle = \langle x+v, A \cdot x + A \cdot v \rangle \\ &= \langle x, A \cdot x \rangle + \langle x, A \cdot v \rangle + \langle v, A \cdot x \rangle + \langle v, A \cdot v \rangle \\ &= f(x) + \langle v, A^T \cdot x \rangle + \langle v, A \cdot x \rangle + \langle v, A \cdot v \rangle. \end{aligned}$$

Donde resulta que

$$f(x+v) = f(x) + \langle (A + A^T) \cdot x, v \rangle + \|v\| \eta(v), \quad (1.6)$$

onde $\eta(v) = \langle A(\frac{v}{\|v\|}), v \rangle$. Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz tem-se $\|\eta(v)\| \leq \|A(\frac{v}{\|v\|})\| \|v\| = \|A \cdot v\| \leq \|A\| \|v\|$, logo $\lim_{v \rightarrow 0} \eta(v) = 0$. Portanto, f é diferenciável e segue de (1.6) que $\nabla f(x) = (A + A^T) \cdot x$, em particular, quando A é simétrica $A^T = A$ então $\nabla f(x) = 2A \cdot x$.

Exemplo 1.2.3. Toda aplicação constante é de classe C^k e sua derivada é a transformação nula.

Exemplo 1.2.4. Toda transformação linear $T \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ é diferenciável. De fato, $T(x + v) = T \cdot x + T \cdot v + 0$, logo $dT(x) = T$. A aplicação derivada $dT : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ é constante, logo T é de classe C^k .

Exemplo 1.2.5. A função $f(x) = \langle x, A \cdot x \rangle$ do Exemplo 1.2.2 também é de classe C^k , pois $df : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{L}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$ é dada por $df(x) = (A + A^T) \cdot x$ que é linear. Assim, quando A for simétrica tem-se $\nabla^2 f(x) = 2A$.

Exemplo 1.2.6. Considere a função traço que associa a matriz $X \in \mathbb{R}^{n^2}$ à soma dos elementos da sua diagonal principal. Se $X = [x_{ij}]$ então

$$\text{tr}(X) = x_{11} + x_{22} + \cdots + x_{nn}.$$

Sabemos que o traço é uma aplicação linear, logo é de classe C^k e para toda matriz $V \in \mathbb{R}^{n^2}$ tem-se $d\text{tr}(X) \cdot V = \text{tr}(V)$. Se $V = E_{ij}$ é a matriz cujo (i, j) -ésimo elemento é igual a 1 e os demais são zeros então

$$\frac{\partial \text{tr}}{\partial x_{ij}}(X) = d\text{tr}(X) \cdot E_{ij} = \text{tr}(E_{ij}) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Portanto, $\nabla \text{tr}(X) = I_n$ (matriz identidade de ordem n) e $\nabla^2 f(x) = 0$.

Uma aplicação é dita r -linear quando é linear em cada uma das suas r entradas, veremos na proposição a seguir que toda aplicação r -linear é diferenciável.

Proposição 1.2.1. Toda aplicação r -linear $\mu : \mathbb{R}^{n_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_r} \rightarrow \mathbb{R}^m$ é diferenciável e sua derivada no ponto $a = (a_1, \cdots, a_r)$ é a transformação linear $d\mu(a) : \mathbb{R}^{n_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_r} \rightarrow \mathbb{R}^m$, dada por

$$d\mu(a) \cdot (v_1, \cdots, v_r) = \sum_{i=1}^r \mu(a_1, \cdots, a_{i-1}, v_i, a_{i+1}, \cdots, a_r).$$

Demonstração. Para facilitar a notação, vamos considerar $r = 2$, o caso geral se obtém de maneira inteiramente análoga. Considere $c = \max\{\mu(e_i, e_j), 1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2\}$. Para quaisquer $x \in \mathbb{R}^{n_1}$ e $y \in \mathbb{R}^{n_2}$ podemos escrever $x = \sum x_i e_i$ e $y = \sum y_j e_j$ e utilizando a norma da soma, tem-se $\|x\| = \sum |x_i|$ e $\|y\| = \sum |y_j|$, logo $\|x\| \|y\| = \sum |x_i| |y_j|$. Pela

bilinearidade de μ , podemos escrever $\mu(x, y) = \sum x_i y_j \mu(e_i, e_j)$, então

$$\begin{aligned} \|\mu(x, y)\| &= \left\| \sum_{i,j} x_i y_j \mu(e_i, e_j) \right\| \leq \sum_{i,j} |x_i| |y_j| \|\mu(e_i, e_j)\| \\ &\leq c \sum_{i,j} |x_i| |y_j| = c \|x\| \|y\|. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Usando novamente a bilinearidade de μ ,

$$\mu(a_1 + v_1, a_2 + v_2) = \mu(a_1, a_2) + \mu(v_1, a_2) + \mu(a_1, v_2) + \mu(v_1, v_2). \quad (1.8)$$

Fazendo uso da norma da soma também em $\mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} = \mathbb{R}^{n_1+n_2}$, temos $\|(v_1, v_2)\| = \|v_1\| + \|v_2\|$ e usando (1.7)

$$\frac{\|\mu(v_1, v_2)\|}{\|(v_1, v_2)\|} \leq \frac{c \|v_1\| \|v_2\|}{\|v_1\| + \|v_2\|} \leq c \|v_1\| \text{ donde, } \lim_{(v_1, v_2) \rightarrow (0,0)} \frac{\mu(v_1, v_2)}{\|(v_1, v_2)\|} = 0. \quad (1.9)$$

Basta tomar $\eta(v_1, v_2) = \mu(v_1, v_2)$ e por (1.8) e (1.9) segue que μ é diferenciável e $d\mu(a_1, a_2) \cdot (v_1, v_2) = \mu(v_1, a_2) + \mu(a_1, v_2)$, como queríamos demonstrar. \square

As funções produto interno $\phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ e a multiplicação de matrizes $\mu : \mathbb{R}^{pn} \times \mathbb{R}^{nm} \rightarrow \mathbb{R}^{pm}$ dadas por $\phi(x, y) = \langle x, y \rangle$ e $\mu(X, Y) = XY$ são exemplos de aplicações bilineares, então pela proposição anterior essas funções são diferenciáveis e suas derivadas são dadas por $d\phi(x, y) \cdot (v, w) = \langle v, y \rangle + \langle x, w \rangle$ e $d\mu(X, Y) \cdot (V, W) = VY + XW$. Em particular, para a função $f : \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$, dada por $f(X) = \mu(X, X) = X^2$ tem-se $df(X) \cdot V = d\mu(X, X) \cdot (V, V) = VX + XV$. Veremos a seguir mais um importante exemplo de aplicação diferenciável que também é consequência da proposição anterior.

Exemplo 1.2.7. Considere a função determinante $\det : \mathbb{R}^n \times \dots \times \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}$. Sabemos da Álgebra Linear que o determinante depende linearmente de cada coluna X_i da matriz $X = (X_1, \dots, X_n) \in \mathbb{R}^{n^2}$. Assim, pela proposição 1.2.1 o determinante é diferenciável e sua derivada no ponto X é o funcional linear $d \det X : \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}$, que assume na matriz $V = (V_1, \dots, V_n) \in \mathbb{R}^{n^2}$ o valor

$$d \det X \cdot (V) = \sum_{k=1}^n \det(X_1, \dots, X_{k-1}, V_k, X_{k+1}, \dots, X_n). \quad (1.10)$$

Utilizando a expansão de Laplace segundo os elementos da i -ésima linha tem-se

$$\det X = \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} x_{ij} X_{[ij]}, \text{ logo } \frac{\partial \det}{\partial x_{ij}}(X) = (-1)^{i+j} X_{[ij]}, \quad (1.11)$$

onde $X_{[ij]}$ é o determinante da matriz $(n-1) \times (n-1)$ que se obtém omitindo a i -ésima linha e a j -ésima coluna de X . Obtemos assim outra forma de verificar a diferenciabilidade do determinante, uma vez que possui derivadas parciais (polinômios) contínuas para todo $X \in \mathbb{R}^{n^2}$. Além disso, usando (1.11) $\nabla \det(X) = (\text{adj.} X)^T$, a transposta da adjunta de X ou a matriz dos cofatores de X . Este fato também se obtém ao aplicar (1.10) na matriz $V = E_{ij}$.

Observação 1.2.2. Toda aplicação r -linear é de classe C^k pois suas funções coordenadas são ainda r -lineares.

A regra da cadeia, bastante conhecida no cálculo unidimensional, também é válida para a derivada de aplicações. O teorema a seguir diz que a derivada da aplicação composta é a composta das derivadas e sua demonstração poderá ser encontrada em [13, Regra da Cadeia, p. 256].

Teorema 1.2.2 (Regra da Cadeia para aplicações). *Sejam $U \subset \mathbb{R}^n$, $V \subset \mathbb{R}^m$ abertos, $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ diferenciável no ponto a , com $f(U) \subset V$, e $g : V \rightarrow \mathbb{R}^p$ diferenciável no ponto $f(a)$. Então $g \circ f : U \rightarrow \mathbb{R}^p$ é diferenciável no ponto a , com $d(g \circ f)(a) = dg(f(a)) \cdot df(a) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$.*

Corolário 1.2.1. *A composta de duas aplicações de classe C^k é uma aplicação de classe C^k .*

Corolário 1.2.2 (Regras de derivação). *Sejam $f, g : U \rightarrow \mathbb{R}^m$, definidas no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ diferenciáveis no ponto $a \in U$ e $\alpha \in \mathbb{R}$. Então a aplicação $(\alpha f + g) : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ é diferenciável em a e vale que $d(\alpha f + g)(a) = \alpha df(a) + dg(a)$.*

Demonstração. As aplicações $s : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $\bar{\alpha} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ definidas por $s(x, y) = x + y$ e $\bar{\alpha}(x) = \alpha x$ são aplicações lineares, logo diferenciáveis e $ds = s$ e $d\bar{\alpha} = \bar{\alpha}$. Veja que $f + g = s \circ (f, g)$ e $\alpha f = \bar{\alpha} \circ f$, donde segue o resultado simplesmente aplicando a regra da cadeia. \square

1.3 Teorema da Aplicação Inversa

Vamos demonstrar nesta seção o Teorema da Aplicação Inversa. Considerado como um dos mais importantes da análise matemática, ele nos permite deduzir algumas propriedades das aplicações apenas analisando propriedades de sua derivada, o que é de grande importância uma vez que a derivada é uma aplicação linear. Esse teorema também irá nos possibilitar chegar ao Teorema da Aplicação Implícita e algumas de suas aplicações, como o método do multiplicador de Lagrange.

Dados $x, y \in \mathbb{R}^n$, o *segmento de reta fechado* ligando x a y é o conjunto: $[x, y] = \{z \mid z = tx + (1 - t)y, 0 \leq t \leq 1\}$. O *segmento de reta aberto* se define de maneira inteiramente análoga e denotamos por (x, y) . O Teorema a seguir também será uma importante ferramenta para a análise de convergência do método de Newton que será demonstrado no Capítulo 2.

Teorema 1.3.1 (Desigualdade do Valor Médio). *Dado $U \subset \mathbb{R}^n$ aberto, seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$ diferenciável em cada ponto do segmento de reta aberto (x, y) e tal que sua restrição ao*

segmento fechado $[x, y] \subset U$ seja contínua. Se $\|df(z)\| \leq M$ para todo $z \in (x, y)$, então $\|f(y) - f(x)\| \leq M\|y - x\|$.

Demonstração. Veja uma demonstração em [13, p. 263]. \square

Um *ponto fixo* de uma aplicação $f : X \rightarrow \mathbb{R}^n$, onde $X \subset \mathbb{R}^n$, é um ponto $x \in X$ tal que $f(x) = x$. Teoremas que asseguram a existência de ponto fixo possui diversas aplicações, como por exemplo o Teorema de Existência e Unicidade de um sistema de equações diferenciáveis [14, Exemplo 37, p. 200].

Lema 1.3.1. *Toda contração $\phi : K \rightarrow K$, definida no compacto $K \subset \mathbb{R}^n$, possui um único ponto fixo.*

Demonstração. Seja $0 < \lambda < 1$, tal que $\|\phi(x) - \phi(y)\| \leq \lambda\|x - y\|$, para todo $x, y \in K$. Considere a função real $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \|\phi(x) - x\|$. Veja que f é contínua e vale que

$$f(\phi(x)) = \|\phi(\phi(x)) - \phi(x)\| \leq \lambda\|\phi(x) - x\| = \lambda f(x), \quad (1.12)$$

para todo $x \in K$. Como $K \subset \mathbb{R}^n$ é compacto, $f(K) \subset \mathbb{R}$ é também compacto, em particular limitado. Seja $\beta = \inf f(K)$, então $0 \leq \beta \leq f(x)$, para todo $x \in K$. Veremos no capítulo 3 que pelo Teorema de Weierstrass (teorema a ser demonstrado naquele capítulo) existe $a \in K$, tal que $\beta = f(a)$. Supondo que $0 < \beta = f(a)$, usando (1.12) tem-se $f(\phi(a)) \leq \lambda f(a) < f(a)$, o que é uma contradição. Assim, $f(a) = 0$, donde $f(a) = \|\phi(a) - a\| = 0 \Leftrightarrow \phi(a) = a$. Para provar a unicidade, suponha que $a, b \in K$ são tais que $\phi(a) = a$ e $\phi(b) = b$, então $\|a - b\| = \|\phi(a) - \phi(b)\| \leq \|a - b\|$, isso implica que $(1 - \lambda)\|a - b\| = 0$, logo $a = b$ e está provado também a unicidade. \square

Dados os conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ e $Y \subset \mathbb{R}^m$, dizemos que uma função $f : X \rightarrow Y$ é um *homeomorfismo* quando f é uma bijeção contínua cuja inversa $f^{-1} : Y \rightarrow X$ também é contínua. Como toda transformação linear é contínua, os isomorfismos lineares são exemplos claros de homeomorfismos, pois a inversa ainda é uma transformação linear. Em particular, as translações $T_p : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $T_p(x) = p + x$ e as homotetias $H_\alpha : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $H_\alpha(x) = \alpha x$, onde $p \in \mathbb{R}^n$ e $\alpha \in \mathbb{R}$ estão fixos, são homeomorfismos, com $T_p^{-1} = T_{-p}$ e $H_\alpha^{-1} = H_{\alpha^{-1}}$. Como a composta de aplicações contínuas é contínua segue que a composta de dois homeomorfismos é um homeomorfismo, além disso, o inverso de um homeomorfismo também o é. O resultado a seguir é essencial para a demonstração do Teorema da Aplicação Inversa.

Lema 1.3.2 (Teorema da Perturbação da Identidade). *Seja $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma contração definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. A aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, dada por $f(x) = x + \phi(x)$, é um homeomorfismo de U sobre o conjunto aberto $f(U) \subset \mathbb{R}^n$.*

Demonstração. Dados $x, y \in U$, seja $0 < \lambda < 1$, tal que $\|\phi(x) - \phi(y)\| \leq \|x - y\|$, então

$$\begin{aligned} \|f(x) - f(y)\| &= \|x + \phi(x) - y - \phi(y)\| \\ &\geq \|x - y\| - \|\phi(x) - \phi(y)\| \\ &\geq \|x - y\| - \lambda\|x - y\| = (1 - \lambda)\|x - y\|. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Decorre de (1.13) que se $x, y \in U$ são tais que $f(x) = f(y)$, então $x = y$, logo f é injetora e segue que $f : U \rightarrow f(U)$ é bijetora. Como f já é contínua, para ser um homeomorfismo, basta mostrar que f^{-1} é contínua. Fazendo $x = f^{-1}(a)$ e $y = f^{-1}(b)$, com $a, b \in f(U)$ e usando (1.13), temos

$$\|f^{-1}(a) - f^{-1}(b)\| = \|x - y\| \leq \frac{1}{1 - \lambda} \|f(x) - f(y)\| = \|a - b\|,$$

isto é, f^{-1} é Lipschitziana, o que mostra ser f^{-1} contínua. Assim, $f : U \rightarrow f(U)$ é um homeomorfismo. Para concluir a demonstração, resta provar que $f(U)$ é aberto em \mathbb{R}^n . Dado $x_0 \in U$, existe $\delta > 0$ tal que $B(x_0, \delta) \subset U$, podemos diminuir o tamanho de δ se necessário, de modo que $B[x_0, \delta] \subset U$. Afirmamos que $B(f(x_0), \epsilon) \subset f(U)$, onde $\epsilon = (1 - \lambda)\delta$. Basta mostrar que, dado $a \in B(f(x_0), \epsilon)$, existe $x \in B(x_0, \delta)$ tal que $f(x) = a$. Para tal, considere a aplicação $\psi : B[x_0, \delta] \rightarrow \mathbb{R}^n$, dada por $\psi(x) = x - f(x) + a$. Veja que $f(x) = a \Leftrightarrow x = \psi(x) = x - f(x) + a$, isto é, $x \in B[x_0, \delta]$ é ponto fixo de ψ . Por hipótese $\psi(x) = a - \phi(x)$, para todo $x \in B[x_0, \delta]$, logo ψ é uma contração, pois ϕ o é. Lembrando que, como $f(x_0) = x_0 + \phi(x_0)$, então $x_0 = f(x_0) - \phi(x_0)$, além disso, dado $x \in B[x_0, \delta]$, tem-se

$$\begin{aligned} \|\psi(x) - x_0\| &= \|a - \phi(x) - x_0\| = \|a - \phi(x) + \phi(x_0) - f(x_0)\| \\ &\leq \|a - f(x_0)\| + \|\phi(x) - \phi(x_0)\| \\ &< \epsilon + \lambda\|x - x_0\| \leq (1 - \lambda)\delta + \lambda\delta = \delta, \end{aligned}$$

ou seja, $\psi(B[x_0, \delta]) \subset B[x_0, \delta]$. Como $B[x_0, \delta]$ é um subconjunto compacto de \mathbb{R}^n , segue do Lema 1.3.1 que ψ possui um único ponto fixo $x \in B[x_0, \delta]$, como queríamos demonstrar. \square

Gostaríamos de observar na demonstração acima que embora $f(U) \subset \mathbb{R}^n$ seja imagem inversa do aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ pela função contínua $f^{-1} : f(U) \rightarrow U$, não podemos concluir que $f(U)$ é aberto em \mathbb{R}^n . Nesse caso, apenas podemos afirmar que $f(U)$ é aberto no domínio de f^{-1} que é o próprio $f(U)$.

Sejam $U, V \subset \mathbb{R}^n$ subconjuntos abertos, um *difeomorfismo* $f : U \rightarrow V$ é uma bijeção diferenciável cuja inversa também é diferenciável. Em particular, f é um homeomorfismo, mas não vale a recíproca, como podemos ver no exemplo $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por $f(x) = x^3$. Neste exemplo, f é claramente um homeomorfismo, mas $f^{-1}(x) = \sqrt[3]{x}$ não é derivável em $x = 0$. Como consequência da Regra da Cadeia, a aplicação composta de dois difeomorfismos é ainda um difeomorfismo. Temos agora, condições de enunciar e provar o Teorema da Aplicação Inversa.

Teorema 1.3.2 (Teorema da Aplicação Inversa). *Seja $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, uma aplicação de classe C^1 definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, tal que no ponto $a \in U$ se tenha $\det f'(a) \neq 0$. Nessas condições, existem os abertos $V \subset U$, com $a \in V$ e $W \subset \mathbb{R}^n$, com $f(a) \in W$, tais que $f : V \rightarrow W$ é um difeomorfismo, e para todo $y \in W$ vale*

$$(f^{-1})'(y) = [f'(f^{-1}(y))]^{-1}. \quad (1.14)$$

Demonstração. A menos de composição com translações, podemos supor que $a = f(a) = 0$. Isso não restringe a generalidade, pois a composição de difeomorfismos é ainda um difeomorfismo. Façamos $T = df(0)$ para facilitar a notação. Pela diferenciabilidade de f em $a = 0$, para $x \in U$ suficientemente próximo do vetor nulo, temos

$$f(x) = T(x) + r(x), \text{ com } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{r(x)}{\|x\|} = 0. \quad (1.15)$$

Isso nos dá $r(0) = f(0) - T(0) = 0$, pois $f(0) = 0$, além de $dr(0) = df(0) - dT(0) = T - T = 0$, uma vez que $T = df(0)$ é uma transformação linear. Como $r \in C^1$ e $dr(0) = 0$, dado $\epsilon > 0$ existe um aberto $V \subset U$ com $0 \in V$ tal que $\|dr(x)\| < \epsilon$, para todo $x \in V$. Assim, como a derivada de r é limitada em V , pela Desigualdade do Valor Médio temos $\|r(x) - r(y)\| \leq \epsilon \|x - y\|$, para todo $x, y \in V$. Como $\det f'(0) \neq 0$ a transformação linear $T = df(0)$ é invertível. Considere então a aplicação $\Psi : V \rightarrow \mathbb{R}^n$ dada por $\Psi(x) = T^{-1}(f(x))$, usando (1.15) tem-se $\Psi(x) = x + T^{-1}(r(x))$. Podemos supor que $\epsilon > 0$ seja suficientemente pequeno de modo que $\epsilon \|T^{-1}\| < 1$. Neste caso, a aplicação $T^{-1} \circ r$ é uma contração, pois

$$\begin{aligned} \|T^{-1}(r(x)) - T^{-1}(r(y))\| &\leq \|T^{-1}\| \|r(x) - r(y)\| \\ &\leq \epsilon \|T^{-1}\| \|x - y\|, \end{aligned}$$

para todo $x, y \in V$. Pelo Lema 1.3.2, segue que Ψ é um homeomorfismo de V sobre o aberto $\Psi(V) \subset \mathbb{R}^n$. Como $\Psi(V) = T^{-1}(f(V))$, então $f(V) = T(\Psi(V))$ é um aberto em \mathbb{R}^n , pois T é um isomorfismo linear (ver Exemplo 1.1.4). Escrevendo $W = f(V)$, a aplicação

$$T \circ \Psi = f|_V : V \rightarrow W,$$

é um homeomorfismo entre V e W , pois Ψ e T o são também. Como $f \in C^1$, a função $x \in V \mapsto \det df(x)$ é composta de aplicações contínuas, logo é contínua. Assim, podemos supor V suficientemente pequeno tal que $\det f'(x) \neq 0$, para todo $x \in V$, isto é, $df(x)$ é invertível para todo $x \in V$. Denominamos $g = f^{-1} : W \rightarrow V$ o homeomorfismo inverso de f , devemos mostrar que g é diferenciável em cada ponto $y = f(x) \in W$. Considerando $T = df(x)$, pela regra da cadeia, se existir $dg(y)$ deverá ser igual a T^{-1} . Fazendo

$$g(y + w) - g(y) = T^{-1}(w) + s(w),$$

mostremos que $\lim_{w \rightarrow 0} s(w)/\|w\| = 0$. Seja $f(x+v) = y+w$, então $w = f(x+v) - y = f(x+v) - f(x)$, veja que $v \rightarrow 0 \Leftrightarrow w \rightarrow 0$, pois f é um homeomorfismo em V . A diferenciabilidade de f em x fornece

$$f(x+v) - f(x) = T(v) + r(v), \text{ onde } \lim_{v \rightarrow 0} \frac{r(v)}{\|v\|} = 0.$$

Assim,

$$\begin{aligned} v &= g(y+w) - x = g(y+w) - g(y) \\ &= T^{-1}(w) + s(w) = T^{-1}(T(v) + r(v)) + s(w) \\ &= v + T^{-1}(r(v)) + s(w), \end{aligned}$$

donde $s(w) = -T^{-1}(r(v))$. Logo

$$\frac{s(w)}{\|w\|} = -\frac{\|v\|}{\|w\|} \left[T^{-1} \left(\frac{r(v)}{\|v\|} \right) \right]$$

Quando $w \rightarrow 0$, a razão $\frac{\|v\|}{\|w\|}$ permanece limitada e o fator entre colchetes tende a 0 pois $v \rightarrow 0$, o que mostra ser g diferenciável para cada $y \in W$, logo $f : V \rightarrow W$ é um difeomorfismo, além disso $dg(y) = T^{-1} = [df(x)]^{-1}$ e como $f'(x)$ é a matriz que representa $df(x)$ (1.14) também está provado. \square

Exemplo 1.3.1. Seja $f : \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$ definida por $f(X) = X^2$. Vimos na seção anterior que f é diferenciável e $df(X) \cdot V = VX + XV$, calculando no ponto $X = I_n$, resulta $df(I_n) \cdot V = 2V$, logo $\det f'(I_n) = 2$. Assim, pelo Teorema da Aplicação Inversa, existem abertos $V, W \subset \mathbb{R}^{n^2}$ ambos contendo $I_n = f(I_n)$, tais que $f : V \rightarrow W$ é um difeomorfismo. Isso mostra que toda matriz $Y \in W$, isto é, suficientemente próxima da identidade possui uma única raiz quadrada.

Finalizaremos este capítulo com a demonstração do Teorema da Aplicação Implícita, este será usado no Capítulo 3 para garantir a existência dos multiplicadores de Lagrange.

Teorema 1.3.3 (Teorema da Aplicação Implícita). *Considere $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação de classe C^1 , definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{m+n}$. Seja $(a, b) \in U$, com $f(a, b) = 0$ tal que $df(a, b) : \{0\}^m \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ seja um isomorfismo, o que é o mesmo que a matriz M de ordem $n \times n$ dada por*

$$M = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_{n+j}}(a, b) \right], \quad 1 \leq i, j \leq n,$$

tenha $\det M \neq 0$. Então, existem abertos $V \subset U$ e $A \subset \mathbb{R}^m$, com $(a, b) \in U$ e $a \in A$ para os quais se tem: dado qualquer $x \in A$, existe um único elemento $y = g(x) \in \mathbb{R}^n$ tal que $(x, g(x)) \in V$ e $f(x, g(x)) = 0$. A função g assim definida é diferenciável.

Demonstração. Considere a aplicação $F : U \rightarrow \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{m+n}$, dada por $F(x, y) = (x, f(x, y))$, então $F \in C^1$, pois $f \in C^1$, além disso $dF(a, b) \cdot (h, k) = (h, df(a, b) \cdot (h, k))$, para todo $(h, k) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$, logo $\det F'(a, b) = \det M \neq 0$. Assim, pelo Teorema da Aplicação Inversa, existem abertos $V \subset U$ e $W \subset \mathbb{R}^{m+n}$, com $(a, b) \in V$ e $F(a, b) = (a, 0) \in W$, tais que $F : V \rightarrow W$ é um difeomorfismo. Diminuindo W , se necessário, podemos supor $W = A \times B$, com $a \in A \subset \mathbb{R}^m$ e $0 \in B \subset \mathbb{R}^n$. Assim, como F é bijetora, para todo $x \in A$ existe um único $y = g(x) \in \mathbb{R}^n$ tal que $(x, g(x)) \in V$ e $F(x, y) = (x, f(x, y)) = (x, 0) \in W$. Portanto, a aplicação $g : A \rightarrow \mathbb{R}^n$ assim definida, satisfaz $f(x, g(x)) = 0$, para todo $x \in A$. Para mostrar a diferenciabilidade de g , considere $G = F^{-1} : W \rightarrow V$, sabemos que G é diferenciável e $G(x, 0) = (x, g(x))$, para todo $x \in A$. Considere também as aplicações diferenciáveis $\pi_2 : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $\xi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$, dadas por $\pi_2(x, y) = y$ e $\xi(x) = (x, 0)$ e veja que $g = \pi_2 \circ G \circ \xi$, mostrando que g é diferenciável, pois é composta de aplicações diferenciáveis. \square

Capítulo 2

Método de Newton

O método de Newton foi proposto por Isaac Newton em dois trabalhos, primeiro no artigo *De analysi per aequationes numero terminorum infinitas* escrito em 1669 e publicado em 1711, como também no livro *De methodis fluxionum et serierum infinitarum* que foi escrito em 1671 e somente publicado 9 anos após a morte de Newton em 1736 por John Colson com o título *Method of Fluxions*. Contudo, a descrição do método nesses trabalhos difere substancialmente do método como conhecemos hoje, pois além de aplicar o método apenas para polinômios, Newton não calculava as aproximações sucessivas x_1, x_2, \dots , mas uma sequência de polinômios, veja [15]. Assim, o método ainda era visto como puramente algébrico e Newton ainda não havia percebido a conexão com o cálculo, o que só aconteceu em 1660 quando Joseph Raphson descreveu o método em termos das aproximações sucessivas para a raiz, em vez da sequência complicada de polinômios usada por Newton. Finalmente, em 1740, Thomas Simpson descreveu o método como um método iterativo para resolver equações não lineares, além de perceber que o método de Newton poderia ser usado para resolver problemas de otimização ao zerar a norma do gradiente.

Este capítulo está dividido em duas seções. Na primeira faremos a descrição do método de Newton para a resolução de equações e na segunda faremos uma análise de convergência, comprovando a convergência pelo menos superlinear do método de Newton.

2.1 O método de Newton para equações

O método de Newton é utilizado em diversos ramos da ciência. É possível afirmar que grande parte da popularidade do método se deve ao fato dele ser reconhecido como uma poderosa ferramenta para resolver equações. Equações aparecem em vários problemas na Matemática, veremos, por exemplo, no Capítulo 3 que as condições de otimalidade de primeira ordem de alguns problemas de Otimização, a saber, o método do multiplicador de Lagrange, são reduzidos à solução de um sistema de equações não lineares. Começaremos apresentando a ideia usada pelo método de Newton para estimar soluções de equações.

Dado $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação diferenciável no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$, vamos considerar o problema de encontrar $x \in U$ tal que

$$\Phi(x) = 0. \quad (2.1)$$

Além disso, vamos admitir que Φ não seja uma aplicação linear, isto é, estamos interessados em resolver sistemas de equações não lineares. A ideia do método de Newton para resolver o problema acima é aproximar alguma solução por uma sequência de pontos obtidos na resolução de um sistema linear dado pela linearização de (2.1). Em outras palavras, dado k um número natural, seja $x_k \in U$ uma aproximação de alguma solução \bar{x} da equação (2.1), pela diferenciabilidade de Φ existe um $\delta > 0$ tal que, para todo $x \in U$ com $\|x - x_k\| < \delta$, tem-se $\Phi(x) - \Phi(x_k) = \Phi'(x_k)(x - x_k) + \|x - x_k\|\eta(x - x_k)$, com $\lim_{x \rightarrow x_k} \eta(x - x_k) = 0$. Assim para essa vizinhança de x_k , podemos aproximar (2.1) pela sua linearização:

$$\Phi(x_k) + \Phi'(x_k)(x - x_k) = 0. \quad (2.2)$$

O subproblema acima é chamado de *equação de iteração* do método de Newton. Abaixo apresentamos o Algoritmo do método de Newton para resolver o problema (2.1).

Algoritmo 1.

Método de Newton

Passo 0. Escolher um ponto inicial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e tomar $k = 0$.

Passo 1. Calcular $x_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ como uma solução da equação linear (2.2).

Passo 2. Tomar $k := k + 1$ e retornar ao passo 1.

Fazendo a mudança de variável $v = x - x_k$ na equação (2.2) segundo o Algoritmo 1 a próxima iteração do método de Newton será $x_{k+1} = x_k + v$, onde v é uma solução do sistema linear

$$\Phi'(x_k)v = -\Phi(x_k), \quad (2.3)$$

também dizemos que v dado acima é a *direção de Newton* a partir de x_k . Supondo que para todo k exista $\Phi'(x_k)^{-1}$ (inversa da jacobiana de Φ em x_k), neste caso a solução de (2.3) é única, então podemos escrever o Algoritmo 1 na forma do esquema iterativo:

$$x_{k+1} = x_k - \Phi'(x_k)^{-1}\Phi(x_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.4)$$

Observamos que mesmo $\Phi'(x_k)$ sendo inversível, não é necessário o cálculo da inversa dessa matriz para computar x_{k+1} dado em (2.4). Em cálculo numérico, estudamos vários métodos que resolvem sistemas lineares sem inverter a matriz associada ao sistema como Eliminação de Gauss e Decomposição LU, veja [4].

Exemplo 2.1.1. A partir do ponto inicial $x_0 = 0$ vamos aplicar o método de Newton para encontrar uma aproximação de erro inferior a 10^{-4} da raiz da função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \exp(x/2) - 2$, isto é, uma aproximação para solução da equação:

$$\exp\left(\frac{x}{2}\right) - 2 = 0. \quad (2.5)$$

Veja que $f'(x) = 1/2 \exp(x/2) \neq 0$, para todo $x \in \mathbb{R}$, de onde segue que:

$$f'(x)^{-1}f(x) = \frac{\exp(\frac{x}{2}) - 2}{\frac{1}{2} \exp(\frac{x}{2})} = 2 - 4 \exp\left(-\frac{x}{2}\right). \quad (2.6)$$

Portanto, o Algoritmo 1 será dado por (2.4) e usando (2.6) obtemos o seguinte esquema iterativo:

$$x_{k+1} = x_k - 2 + 4 \exp\left(-\frac{x_k}{2}\right), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.7)$$

Assim, dado $x_0 = 0$ podemos usar (2.7) para calcular x_1 e assim sucessivamente. Veja na Tabela 1, obtida por meio do software Matlab, as informações em cada iteração do método de Newton, onde o critério de parada foi $|f(x_k)| < 10^{-4}$. Na Figura 1, apresentamos a representação geométrica do esquema iterativo dado em (2.7).

Tabela 1 – Iterações do método de Newton aplicado ao problema (2.5).

k	x_k	$ f(x_k) $
0	0	1
1	2	0.7182818284590455
2	1.4715177646857691	0.0870652286345326
3	1.3880845998378306	0.0017910401957284
4	1.3862951621195427	0.0000008009998127

Na última coluna $|f(x_k)|$ está diminuindo a cada iteração, indicando que $f(x_k)$ está cada vez mais próximo de 0.

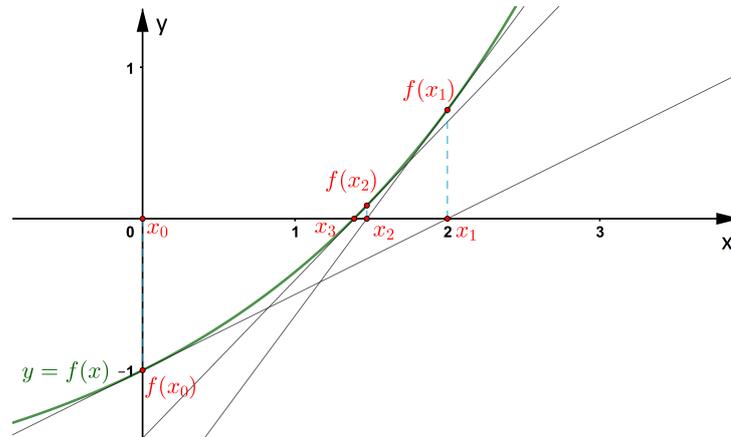
Exemplo 2.1.2. Considere o sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 2 \\ x^2 - y^2 = 1 \end{cases} \quad (2.8)$$

Para resolver o sistema 2.8, definimos $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por $\Phi(x, y) = (x^2 + y^2 - 2, x^2 - y^2 - 1)$ e consideremos o problema equivalente de encontrar $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ tal que

$$\Phi(x, y) = 0. \quad (2.9)$$

Figura 1 – Representação geométrica do método de Newton aplicado ao problema (2.5).



Dado um ponto inicial x_k suficientemente próximo de uma raiz de f , a próxima iteração do método de Newton é a interseção da reta tangente a função f no ponto $(x_k, f(x_k))$ com o eixo x .

A aplicação Φ é diferenciável pois suas coordenadas o são. Vamos então aplicar o método de Newton no problema 2.9 para encontrarmos uma aproximação de uma solução do sistema não linear (2.8). Esse sistema admite quatro soluções, como mostra a Figura 2. Observe que a matriz jacobiana de Φ é dada por

$$\Phi'(x) = 2 \begin{bmatrix} x & y \\ x & -y \end{bmatrix} \Rightarrow \Phi'(x)^{-1} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} x^{-1} & x^{-1} \\ y^{-1} & -y^{-1} \end{bmatrix},$$

desde que $x, y \neq 0$. Assim, seja $(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2$ tal que $x_k, y_k \neq 0$, então podemos usar o esquema iterativo dado em (2.4), obtendo:

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \frac{1}{4} \begin{bmatrix} x_k^{-1} & x_k^{-1} \\ y_k^{-1} & -y_k^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k^2 + y_k^2 - 2 \\ x_k^2 - y_k^2 - 1 \end{bmatrix}, \quad k = 0, 1, \dots$$

onde

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2x_k + 3x_k^{-1} \\ 2y_k + y_k^{-1} \end{bmatrix}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Para encontrarmos uma aproximação da solução do primeiro quadrante vamos escolher $x_0 = (1, 1)$ como ponto inicial e vejamos na Tabela 2 as informações em cada iterada, obtidas no software Matlab, onde o critério de parada foi $\|\Phi(x_k, y_k)\| < 10^{-4}$.

2.2 Análise de Convergência

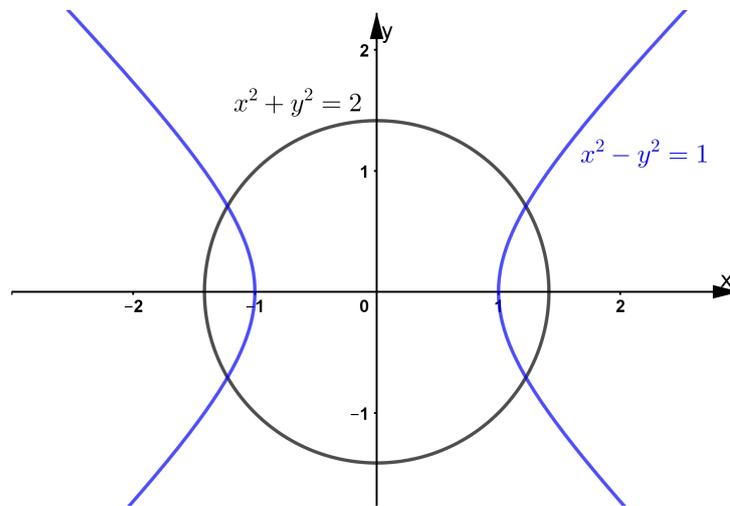
Os exemplos anteriores sugerem que o método de Newton gera uma sequência bem definida e que converge de maneira rápida para uma solução do problema (2.1). O objetivo dessa seção é formalizar e demonstrar a convergência da sequência gerada pelo método de

Tabela 2 – Iterações do método de Newton aplicado ao problema 2.9.

k	x_k	y_k	$\ \Phi(x_k, y_k)\ $
0	1	1	1
1	1.25	0.75	0.125
2	1.2250000000000001	0.7083333333333334	0.0026094853094524
3	1.2247448979591837	0.7071078431372549	0.0000021258960557

Na última coluna $\|\Phi(x_k, y_k)\|$ está diminuindo a cada iteração, indicando que $\Phi(x_k, y_k)$ está cada vez mais próximo de $(0, 0)$.

Figura 2 – Representação geométrica das soluções do sistema não linear (2.8).



A curva $x^2 + y^2 = 2$ intercepta a curva $x^2 - y^2 = 1$ em quatro pontos.

Newton. Para isso, começaremos com algumas definições que nos permitirão entender a noção de taxa de convergência de uma sequência.

Uma sequência de pontos em \mathbb{R}^n é, como sabemos, uma aplicação $\mathbb{N} \ni k \mapsto x_k \in \mathbb{R}^n$, definida no conjunto \mathbb{N} dos naturais. Usaremos a notação $\{x_k\}$ para indicar a sequência cujo o k -ésimo termo é $x_k \in \mathbb{R}^n$ e por conveniência consideramos que $0 \in \mathbb{N}$. Dizemos que $\{x_k\} = \{x_0, x_1, x_2, \dots\}$ converge para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ quando, para todo $\epsilon > 0$ dado, é possível obter $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $k \geq k_0 \Rightarrow \|x_k - \bar{x}\| < \epsilon$ e denotamos por $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \bar{x}$ ou simplesmente $x_k \rightarrow \bar{x}$. Como duas normas em \mathbb{R}^n são equivalentes, a noção de convergência de uma sequência independe da norma escolhida. Vimos na seção anterior que o esquema iterativo do método de Newton produz uma sequência de pontos e caso essa sequência seja convergente, gostaríamos de saber o quão rapidamente se dá esta convergência.

Considere uma sequência $\{x_k\}$ em \mathbb{R}^n , dizemos que x_k converge linearmente para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, quando existe uma constante $c \in [0, 1)$ e um número natural k_0 , tais que

$$\frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} \leq c, \tag{2.10}$$

para todo $k \geq k_0$. Se uma sequência cumpre a condição (2.10), então

$$\begin{aligned}\|x_{k_0+1} - \bar{x}\| &\leq c\|x_{k_0} - \bar{x}\| \\ \|x_{k_0+2} - \bar{x}\| &\leq c\|x_{k_0+1} - \bar{x}\| \leq c^2\|x_{k_0} - \bar{x}\|.\end{aligned}$$

Repetindo o processo acima, obtemos

$$\|x_{k_0+p} - \bar{x}\| \leq c^p\|x_{k_0} - \bar{x}\|, \quad (2.11)$$

para todo $p \in \mathbb{N}$. Como $c^p \rightarrow 0$, pois $c \in [0, 1)$ segue de (2.11) que $x_k \rightarrow \bar{x}$. Uma sequência $\{x_k\}$ em \mathbb{R}^n é dita *superlinearmente convergente* para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ quando

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} = 0. \quad (2.12)$$

A condição (2.12) também implica que $x_k \rightarrow \bar{x}$, basta observar que dado $0 < \epsilon < 1$ existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $\|x_{k+1} - \bar{x}\| \leq \epsilon\|x_k - \bar{x}\|$, para todo $k \geq k_0$.

Exemplo 2.2.1. A sequência $x_k = 1/3^k$ converge linearmente para 0, mas não superlinearmente. De fato, basta notar que

$$\frac{|x_{k+1}|}{|x_k|} = \frac{1}{3^{k+1}}3^k = \frac{1}{3}.$$

Exemplo 2.2.2. A sequência $x_k = 1/2^{k^2}$ converge superlinearmente para 0, pois

$$\frac{|x_{k+1}|}{|x_k|} = \frac{2^{k^2}}{2^{(k+1)^2}} = \frac{1}{2^{2k+1}} \rightarrow 0.$$

Veremos agora uma forma de convergência ainda mais rápida do que a superlinear. Seja $\{x_k\}$ uma sequência em \mathbb{R}^n que converge para $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, dizemos que $\{x^k\}$ converge com *ordem quadrática* para \bar{x} se existe um número natural k_0 e uma constante $M > 0$, tal que

$$\|x^{k+1} - \bar{x}\| \leq M\|x^k - \bar{x}\|^2, \quad (2.13)$$

para todo $k \geq k_0$. É fácil ver que a convergência quadrática implica na convergência superlinear. No entanto, apenas a condição (2.13) não implica que $x_k \rightarrow \bar{x}$, como veremos no exemplo a seguir

Exemplo 2.2.3. A sequência $x_k = 2^k$ é ilimitada, logo não converge para nenhum $\bar{x} \in \mathbb{R}$, mas

$$\frac{|x_{k+1}|}{|x_k|^2} = \frac{2^{k+1}}{2^{2k}} = \frac{2}{2^k} \rightarrow 0.$$

Exemplo 2.2.4. A sequência dada por $x_k = 1/2^{2^k}$ claramente converge para 0, além disso

$$\frac{\|x_{k+1}\|}{\|x_k\|^2} = \frac{(2^{2^k})^2}{2^{2^{k+1}}} = 1,$$

logo a convergência é quadrática. Vejamos alguns termos desta sequência

$$\begin{aligned}x_0 &= \frac{1}{2} = 0,5, \\x_1 &= \frac{1}{2^2} = \frac{1}{4} = 0,25, \\x_2 &= \frac{1}{2^{2^2}} = \frac{1}{16} = 0,0625, \\x_3 &= \frac{1}{2^{2^3}} = \frac{1}{256} = 0,00390625, \\x_4 &= \frac{1}{2^{2^4}} = \frac{1}{65536} = 0,000015258, \\&\vdots\end{aligned}$$

Observe que a partir do terceiro termo o número de decimais iguais a zero é duplicado, esta é uma característica da convergência quadrática de sequências numéricas.

No caso de uma sequência em \mathbb{R}^n , não necessariamente numérica, a característica da convergência quadrática, observada no exemplo anterior, pode ser vista no número de decimais iguais a zero do erro $\|x_k - \bar{x}\|$. Temos agora tudo o que precisamos para fazer a análise de convergência do método de Newton. O lema a seguir irá nos fornecer uma vizinhança em que o método de Newton estará bem definido.

Lema 2.2.1. *Seja $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Se $\det \Phi'(\bar{x}) \neq 0$, então existem constantes $\delta, M > 0$ tais que*

$$\det \Phi'(x) \neq 0 \quad e \quad \|\Phi'(x)^{-1}\| \leq M,$$

para todo $x \in B(\bar{x}, \delta)$.

Demonstração. Já vimos na demonstração do Teorema da Aplicação Inversa (1.3.2) que existe um aberto $V \subset \mathbb{R}^n$ tal que $\det \Phi'(x) \neq 0$, para todo $x \in V$. Considere $c = 1/(2\|\Phi'(\bar{x})^{-1}\|)$, dado $v \in \mathbb{R}^n$ podemos escrever $\|v\| = \|\Phi'(\bar{x})^{-1}\Phi'(\bar{x})v\| \leq \|\Phi'(\bar{x})^{-1}\|\|\Phi'(\bar{x})v\|$, o que implica $\|\Phi'(\bar{x})v\| \geq 2c\|v\|$. Pela continuidade de $\Phi' : U \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$ em \bar{x} existe $\delta > 0$ tal que, se $x \in B(\bar{x}, \delta)$ então $\|\Phi'(x) - \Phi'(\bar{x})\| \leq c$, além disso

$$\begin{aligned}\|\Phi'(x)v\| &= \|\Phi'(\bar{x})v + (\Phi'(x) - \Phi'(\bar{x}))v\| \\&\geq \|\Phi'(\bar{x})v\| - \|(\Phi'(x) - \Phi'(\bar{x}))v\| \geq 2c\|v\| - c\|v\|,\end{aligned}$$

donde

$$\|\Phi'(x)v\| \geq c\|v\|. \tag{2.14}$$

Como V é aberto, podemos diminuir o tamanho de δ , se necessário, de modo que $B(\bar{x}, \delta) \subset V$. Portanto, se $x \in B(\bar{x}, \delta)$, usando (2.14) temos que $\|v\| = \|\Phi'(x)\Phi'(x)^{-1}v\| \geq c\|\Phi'(x)^{-1}v\|$, implicando que $\|\Phi'(x)^{-1}v\| \leq \|v\|/c$, para todo $v \in \mathbb{R}^n$, logo $\|\Phi'(x)^{-1}\| \leq 1/c$. Concluimos a demonstração tomando $M = 1/c$. \square

Dizemos que $U \subset \mathbb{R}^n$ é *convexo* se para quaisquer $x, y \in U$, $[x, y] \subset U$. O exemplo abaixo mostra um importante conjunto que é convexo:

Exemplo 2.2.5. Seja $U = B(a, r)$, então U é convexo. De fato, dados $x, y \in U$, temos $\|x - a\| < r$ e $\|y - a\| < r$, então, para qualquer $t \in [0, 1]$, tem-se

$$\|(1-t)x + ty - a\| = \|(1-t)(x-a) + t(y-a)\| \leq (1-t)\|x-a\| + t\|y-a\| < r.$$

De maneira análoga se verifica que $B[a, r]$, a bola fechada de centro em a e raio $r > 0$, também é convexa.

Os dois lemas a seguir são essencialmente uma outra versão da Desigualdade do Valor Médio. Estes serão úteis no estudo da velocidade de convergência do método de Newton.

Lema 2.2.2. Considere $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, de classe C^1 , definida em $U \subset \mathbb{R}^n$ aberto e convexo. Seja $\beta = \sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(tx + (1-t)y) - \Phi'(x)\|$ com $x, y \in U$, então

$$\|\Phi(x) - \Phi(y) - \Phi'(x)(x-y)\| \leq \beta\|x-y\|.$$

Demonstração. Fixando $x \in U$, considere $h : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, dada por $h(z) = \Phi(z) - \Phi'(x)z$, tem-se que h é diferenciável em $[x, y]$, pois U é convexo. Além disso, $\|h'(z)\| = \|\Phi'(z) - \Phi'(x)\| \leq \beta$ para todo $z \in [x, y]$. Assim, segue da Desigualdade do Valor Médio que $\|\Phi(x) - \Phi(y) - \Phi'(x)(x-y)\| = \|h(x) - h(y)\| \leq \beta\|x-y\|$. \square

Lema 2.2.3. Se além das hipóteses do lema anterior, a derivada de Φ for Lipschitziana com constante $L > 0$, então

$$\|\Phi(x) - \Phi(y) - \Phi'(x)(x-y)\| \leq L\|x-y\|^2,$$

para todo $x, y \in U$.

Demonstração. Fixados $x, y \in U$, defina $\beta = L\|x-y\|$ e $h : U \rightarrow \mathbb{R}^n$, dada por $h(z) = \Phi(z) - \Phi'(x)z$. Assim, $\|h'(z)\| = \|\Phi'(z) - \Phi'(x)\| \leq L\|z-x\| \leq L\|x-y\| = \beta$, para todo $z \in [x, y]$. Como no Lema anterior o resultado segue por meio da aplicação direta da Desigualdade do Valor Médio. \square

Reunimos agora os resultados necessários para demonstrarmos que o método de Newton está bem definido e que converge pelo menos superlinearmente para uma solução do problema (2.1).

Teorema 2.2.1 (Convergência local do método de Newton). *Seja $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação de classe C^1 definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Se $\bar{x} \in U$ é tal que $\Phi(\bar{x}) = 0$ e a matriz $\Phi'(\bar{x})$ é invertível (i.e. $\det \Phi'(\bar{x}) \neq 0$), para qualquer ponto inicial $x_0 \in U$ suficientemente*

próximo a \bar{x} , o método de Newton gera uma sequência $\{x_k\}$ bem definida que converge superlinearmente para \bar{x} . Além disso, se Φ' for Lipschitziana numa vizinhança de \bar{x} , então a taxa de convergência é quadrática.

Demonstração. Sejam $\delta, M > 0$ as constantes dadas no (Lema 2.2.1), fazendo $B = B(\bar{x}, \delta)$, tem-se,

$$\det \Phi'(x) \neq 0, \quad \|\Phi'(x)^{-1}\| \leq M, \quad \forall x \in B. \quad (2.15)$$

Para $x_k \in B$, (2.15) mostra que a iterada x_{k+1} do Algoritmo 1 está bem definida e é dada por (2.4), além disso

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - \bar{x}\| &= \|\bar{x} - x_k + \Phi'(x_k)^{-1}\Phi(x_k)\| \\ &= \|\Phi'(x_k)^{-1}(\Phi(x_k) - \Phi'(x_k)(x_k - \bar{x}))\| \\ &= \|\Phi'(x_k)^{-1}(\Phi(x_k) - \Phi(\bar{x}) - \Phi'(x_k)(x_k - \bar{x}))\| \\ &\leq \|\Phi'(x_k)^{-1}\| \|\Phi(x_k) - \Phi(\bar{x}) - \Phi'(x_k)(x_k - \bar{x})\|. \end{aligned}$$

Usando novamente (2.15) tem-se

$$\|x_{k+1} - \bar{x}\| \leq M \|\Phi(x_k) - \Phi(\bar{x}) - \Phi'(x_k)(x_k - \bar{x})\|. \quad (2.16)$$

Podemos diminuir o tamanho de δ se necessário de forma que $\sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(tx + (1-t)y) - \Phi'(x)\| < 1/2M$, para todo $x, y \in B$. Usando (2.16) e o (Lema 2.2.2), obtemos

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - \bar{x}\| &\leq M \|\Phi(x_k) - \Phi(\bar{x}) - \Phi'(x_k)(x_k - \bar{x})\| \\ &\leq M \sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(tx_k + (1-t)\bar{x}) - \Phi'(x_k)\| \|x_k - \bar{x}\| \\ &\leq \frac{1}{2} \|x_k - \bar{x}\|. \end{aligned}$$

O argumento acima pode ser repetido de modo que para todo $c_k \in (0, 1/k)$ encontramos $\delta_k < \delta$, na medida em que x_k se aproxima de \bar{x} , isto é, se $x_k \in B(\bar{x}, \delta_k) \subset B$,

$$\|x_{k+1} - \bar{x}\| \leq c_k \|x_k - \bar{x}\| \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} = 0. \quad (2.17)$$

Portanto, para x_0 suficientemente próximo de \bar{x} , (2.17) mostra que $\{x_k\}$ converge superlinearmente para \bar{x} . Quando Φ' é Lipschitziana com constante $L > 0$ em B , usando o (Lema 2.2.3) obtemos,

$$\|x_{k+1} - \bar{x}\| \leq ML \|x_k - \bar{x}\|^2,$$

ou seja, a convergência é quadrática. \square

Exemplo 2.2.6. Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dada por $f(x) = x/\sqrt{1+x^2}$. É fácil ver que a única raiz de f é $\bar{x} = 0$, vamos então verificar a convergência do método de Newton para esse

ponto. Veja que $f \in C^1$ e sua derivada é dada por $f'(x) = 1/\sqrt{(1+x^2)^3}$, logo $f'(x) \neq 0$ para todo $x \in \mathbb{R}$. Portanto, as iterações do Algoritmo 1 serão dadas por (2.4), donde

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k}{\sqrt{1+x_k^2}} \sqrt{(1+x_k^2)^3} = x_k - x_k(1+x_k^2) = -x_k^3. \quad (2.18)$$

Se $|x_0| < 1$ a sequência gerada pelo método de Newton dada em (2.18) converge para \bar{x} , mas se $|x_0| > 1$ a mesma sequência claramente não converge.

O Exemplo anterior mostra que apesar de possuir convergência rápida, em geral a convergência do método de Newton é apenas local, isto é, para um ponto inicial x_0 que não esteja suficientemente próximo da solução o método pode não convergir, mesmo a solução satisfazendo todas as outras hipóteses do teorema de convergência.

Capítulo 3

Aplicações

A velocidade de convergência e a simplicidade do método de Newton tornam este método uma ferramenta extremamente importante para a Matemática Aplicada, uma vez que muitos problemas práticos ao serem modelados matematicamente podem ser resolvidos utilizando o método de Newton. Veremos neste capítulo o uso do método de Newton para resolver problemas relacionados a aplicações em robótica e processamento de imagens. Contudo, para justificar o uso do método de Newton na resolução desses problemas precisaremos primeiro entender alguns aspectos da teoria de Otimização.

3.1 Introdução à Otimização

Otimizar é um dos poucos conceitos matemáticos que poderíamos perguntar a qualquer pessoa e ela, com uma alta probabilidade, nos daria uma boa noção para esse termo. Isso porque segundo o Dicionário Aurélio "otimizar é um verbo que significa criar condições mais favoráveis para; tirar o melhor partido possível de algo". Ao passo que matematicamente, poderíamos dizer que otimizar é um processo que permite encontrar a melhor maneira de realizar algo, desde que esse 'melhor' tenha uma boa definição matemática. Observe que quando fazemos compras queremos minimizar o dinheiro gasto de forma que maximizemos a qualidade dos produtos, além disso encontrar melhores rotas que diminuam gastos é algo comum tanto no cotidiano das pessoas quanto das empresas, afinal, quem nunca gastou mais combustível errando o caminho? Ou, qual empresa que nunca mudou a rota dos veículos testando o caminho mais curto para gerar economia? Otimização, direta ou indiretamente, faz parte do nosso dia a dia e na maioria das vezes, mesmo inconscientes estamos otimizando algo. Na Matemática, a Otimização consiste em encontrar pontos críticos de uma aplicação, com valores pertencentes a um determinado conjunto. Nesta seção, apresentaremos alguns dos principais conceitos e resultados básicos da Teoria de Otimização que serão utilizados neste trabalho, dos quais veremos um importante teorema de existência de solução, bem como algumas condições

de otimalidade para um problema de minimização.

Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida no aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e dado um conjunto não vazio $D \subset \Omega$, o problema a considerar será o seguinte:

$$\text{Minimizar } f(x) \text{ sujeito a } x \in D. \quad (3.1)$$

Dizemos que um ponto $\bar{x} \in D$ é um *minimizador global* em relação ao problema (3.1) se $f(\bar{x}) \leq f(x)$ para todo $x \in D$, por outro lado, esse ponto será chamado de *minimizador local* quando existir um aberto $U \subset \Omega$ com $\bar{x} \in U$, tal que $f(\bar{x}) \leq f(x)$ para todo $x \in D \cap U$. Quando $D = \mathbb{R}^n$, dizemos que o problema (3.1) é *irrestrito* e quando $D \neq \mathbb{R}^n$ chamaremos de problema *restrito*, além disso, chamaremos f de *função objetivo* e o conjunto D de *conjunto viável*. Em problemas de otimização restrita, tipicamente, o conjunto viável pode ser definido por um sistema de igualdades e/ou desigualdades. Por exemplo, dado as aplicações $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^l$ e $h : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$, definimos $D = \{x \in \Omega ; g(x) = 0, h(x) \leq 0\}$. Como veremos a seguir, as condições de otimalidade (condições que a solução deve satisfazer) para esse problema estão fortemente relacionadas à estrutura do conjunto viável. Nesta seção, iremos apresentar condições de otimalidade para problemas irrestritos, bem como para caso restrito quando o conjunto viável é descrito por um sistema de igualdades. Recomendamos [8] ao leitor interessado em conhecer aspectos mais gerais da teoria de otimização. Começaremos essa seção com um clássico teorema da análise que nos diz sob que condições uma função objetivo e um conjunto viável precisam satisfazer para garantir a existência de um minimizador global.

Teorema 3.1.1 (Teorema de Weierstrass). *Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ contínua no aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, se $D \subset \Omega$ é compacto não-vazio, então existe minimizador global de f em D .*

Demonstração. Sabemos que a compacidade é um invariante topológico, logo $A = f(D)$ é um conjunto compacto em \mathbb{R} . Em particular, A é limitado e pela completude da reta, existe $m = \inf A$, o ínfimo de A . Suponhamos por contradição que $m < f(x)$, para todo $x \in D$. Então a função $g : D \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $g(x) = 1/(f(x) - m)$ é contínua em D , mas pela definição de ínfimo é fácil ver que g é ilimitada em D , o que é uma contradição pois D é compacto. Portanto, existe $\bar{x} \in D$ tal que $f(\bar{x}) = m$. \square

A condição de otimalidade que apresentaremos a seguir é chamada de condição necessária de primeira ordem, pois utiliza apenas informações da primeira derivada da função objetivo para encontrar candidatos a minimizadores do problema (3.1). Esta condição será suficiente para os propósitos deste trabalho, não obstante o leitor interessado encontrará em [8] condições necessárias de segunda ordem, a qual utiliza informações da segunda derivada.

Teorema 3.1.2. *Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida no aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e diferenciável no ponto $\bar{x} \in \Omega$. Se \bar{x} é um minimizador local irrestrito de f , então*

$$\nabla f(\bar{x}) = 0. \quad (3.2)$$

Demonstração. Considere $d \in \Omega$ uma direção arbitrária, como \bar{x} é minimizador local de f e Ω é aberto, existe $\delta > 0$ tal que $f(\bar{x}) \leq f(\bar{x} + td)$, para todo $t \in [0, \delta]$. Pela diferenciabilidade de f em \bar{x} , tem-se

$$f(\bar{x} + td) = f(\bar{x}) + t\nabla f(\bar{x})^T d + t\|d\|\eta(td), \quad (3.3)$$

com $\lim_{t \rightarrow 0} \eta(td) = 0$. Dividindo (3.3) por t e usando o fato de \bar{x} ser um minimizador local, teremos

$$0 \leq \nabla f(\bar{x})^T d + \|d\|\eta(td). \quad (3.4)$$

Tomando o limite em (3.4) quando $t \rightarrow 0$, obtemos $\nabla f(\bar{x})^T d \geq 0$. Suponha que $\nabla f(\bar{x})$ não é nulo, então podemos tomar $d = -\nabla f(\bar{x})$ e teríamos que $\|\nabla f(\bar{x})\|^2 = -\nabla f(\bar{x})^T d \leq 0$, o que é uma contradição. Portanto, $\nabla f(\bar{x}) = 0$. \square

Quando o problema (3.1) é irrestrito, ou mais geralmente, quando o conjunto viável é aberto, os pontos que satisfazem a condição (3.2) são chamados de *pontos críticos*. Se a matriz Hessiana de f for definida positiva em um ponto crítico, podemos afirmar que de fato esse ponto é minimizador local de f , este é o conteúdo do próximo teorema.

Teorema 3.1.3. *Seja $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ definida em um aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ uma função de classe C^2 . Se $\bar{x} \in \Omega$ é um ponto crítico (cumpra a condição (3.2)) e tem-se*

$$\langle \nabla^2 f(\bar{x}) \cdot d, d \rangle > 0, \quad (3.5)$$

para todo $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, então \bar{x} é um minimizador local do problema (3.1). Reciprocamente se $\bar{x} \in \Omega$ é um minimizador local de f então vale a condição (3.5).

Demonstração. Veja uma demonstração em [8, Teorema 1.3.3, p. 18]. \square

Mesmo a função objetivo sendo diferenciável, se o conjunto viável não é aberto o processo para encontrar pontos candidatos à solução se torna extremamente difícil e irá depender fortemente das características desse conjunto. Pelo menos no caso em que conseguimos descrever o conjunto viável por uma equação ou um sistema de equações será possível encontrar candidatos à solução por meio de um método brilhante que será apresentado no próximo teorema. Esse resultado é devido a Joseph Louis Lagrange, seus trabalhos em otimização com várias variáveis resultou na técnica que hoje conhecemos como multiplicadores de Lagrange, ele tinha apenas 19 anos quando inventou esse método e até muito tarde em sua vida ainda o considerava como o seu melhor trabalho em Matemática.

Teorema 3.1.4 (Teorema do Multiplicador de Lagrange). *Sejam $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, definidas em um aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ de classe C^1 e $D = \{x \in \Omega; g(x) = 0\}$ a superfície de nível 0 de g , com $\nabla g(x) \neq 0$ para todo $x \in D$. Seja $\bar{x} \in D$ um minimizador local de f . Então existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que*

$$\nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x}). \quad (3.6)$$

Demonstração. Para facilitar a notação iremos considerar $n = 2$, isto é $\Omega \subset \mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, o caso geral é análogo e se obtém por meio de ligeiras adaptações desse caso particular ao considerarmos $\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{n-1} \times \mathbb{R}$. Seja $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in D$, como $\nabla g(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \neq (0, 0)$, podemos supor sem perda de generalidade que $\frac{\partial g}{\partial y}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \neq 0$. Assim, pelo Teorema da Aplicação Implícita podemos concluir que D é localmente no ponto \bar{x} , o gráfico de uma função diferenciável, ou seja, existem abertos $I, J \subset \mathbb{R}$, com $\bar{x}_1 \in I$ e $\bar{x}_2 \in J$, e uma função diferenciável $\phi : I \rightarrow J$ tais que,

$$g(x, \phi(x)) = 0, \quad (3.7)$$

para todo $x \in I$, e veja que $\phi(\bar{x}_1) = \bar{x}_2$. Como $\bar{x} \in D$ é um minimizador local de f , então existem abertos $B = I' \times J' \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ tal que $f(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \leq f(x, y)$, para todo $(x, y) \in B \cap D$. Pela continuidade de ϕ existe $\delta > 0$ tal que $|x - \bar{x}_1| < \delta$ então $\phi(x) \in J \cap J'$. Assim, a função $\psi : B(\bar{x}_1, \delta) \rightarrow \mathbb{R}$, dada por $\psi(x) = f(x, \phi(x))$ admite um minimizador local em \bar{x}_1 , logo pelo Teorema 3.1.2 $\psi'(\bar{x}_1) = 0$, ou seja,

$$\nabla f(\bar{x}_1, \bar{x}_2)^T [1 \ \phi'(\bar{x}_1)] = 0. \quad (3.8)$$

Por outro lado, aplicando a regra da cadeia em (3.7) resulta

$$\nabla g(\bar{x}_1, \bar{x}_2)^T [1 \ \phi'(\bar{x}_1)] = 0. \quad (3.9)$$

Portanto, segue de (3.8) e (3.9) que os vetores $\nabla f(\bar{x})$ e $\nabla g(\bar{x})$ são ortogonais a um mesmo vetor não nulo. Logo, os vetores $\nabla f(\bar{x})$ e $\nabla g(\bar{x}) \neq 0$ são paralelos, donde segue (3.6). \square

Quando o conjunto viável no problema (3.1) é dado por $D = \{x \in \Omega; g(x) = 0\}$ dizemos que $\bar{x} \in D$ é um *ponto estacionário* desse problema se (3.6) é satisfeito para algum $\lambda \in \mathbb{R}$. Este λ é chamado de *multiplicador de Lagrange*, associado ao ponto estacionário \bar{x} . O sistema de equações

$$\begin{aligned} \nabla f(x) - \lambda \nabla g(x) &= 0, \\ g(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

em relação a $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ caracteriza então os pontos estacionários e os multiplicadores de Lagrange associados e recebe o nome de *sistema de Lagrange*. É fácil ver que o número de variáveis desse sistema é igual ao número de equações. Para apresentarmos a condição

suficiente a seguir, vamos formular o problema acima em termos de sua Lagrangiana. De forma equivalente, podemos escrever (3.10) como sendo

$$\nabla L(x, \lambda) = 0, \quad (3.11)$$

onde $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é dada por $L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x)$. Dizemos que L é a *Lagrangiana* do problema (3.1) quando $D = \{x \in \mathbb{R}^n; g(x) = 0\}$.

Teorema 3.1.5. *Sejam $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, definidas em um aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ funções de classe C^2 e $\bar{x} \in D$ tal que $\nabla g(\bar{x}) \neq 0$. Se \bar{x} é um ponto estacionário do problema (3.1) com $\bar{\lambda}$ o multiplicador de Lagrange associado e vale*

$$\left\langle \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(\bar{x}, \bar{\lambda}) \cdot y, y \right\rangle > 0, \quad (3.12)$$

para todo $y \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ que satisfaz $\langle y, \nabla g(\bar{x}) \rangle = 0$, então \bar{x} é minimizador local do problema (3.1). Reciprocamente, se \bar{x} for um minimizador local de (3.1), então vale a condição (3.12).

Demonstração. Veja uma demonstração em [8, Teorema 2.3.2, p. 59]. □

Vale ressaltar que existem versões mais gerais do Teorema do Multiplicador de Lagrange que podem ser encontradas em [8, Teorema 2.2.2, p. 52] e [13, Teorema dos Multiplicadores de Lagrange, p. 331].

Observação 3.1.1. Caso f seja de classe C^2 uma forma de resolver o problema (3.1) é aplicar o método de Newton na equação (3.2) encontrando assim pontos críticos no interior do conjunto viável, em seguida analisar o comportamento da função na fronteira. Caso a fronteira do conjunto viável seja descrita por um sistema de igualdades em que a função g seja também de classe C^2 , aplicamos novamente o método de Newton para resolver o sistema (3.11) do qual resultará nos pontos estacionários que se unirão aos pontos críticos como candidatos a solução do problema de otimização.

3.2 Quociente de Rayleigh na esfera unitária

Todos nós já fizemos alguma busca no Google e nos surpreendemos com milhões de resultados que são retornados, mas por algum motivo aquilo que estávamos procurando foi nos apresentado nas primeiras páginas exibidas, isso nos leva à seguinte pergunta: o que define a importância de uma página segundo o Google? Essa pergunta levou o Google a desenvolver um incrível método chamado de algoritmo PageRank que ordena os resultados de uma busca de acordo sua "importância". Segundo [16] definir a importância de uma página pode ser modelado matematicamente pelo problema de encontrar o autovetor associado ao maior autovalor da chamada matriz do Google (matriz onde se organiza os

sites). Para mais, de acordo [10], em processamento de imagens sob o aspecto de economizar armazenamento de dados, também encontramos um problema de autovetor. À vista disso, podemos afirmar que encontrar autovetores é um problema matemático essencial, mas que também sabemos ser, em geral, bastante complicado. Nesta seção, veremos como transformar um problema de autovetor em um problema de otimização e assim utilizar as técnicas estudados até aqui para resolvê-lo.

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, um vetor $v \in \mathbb{R}^n$ é chamado de *autovetor* de A quando $v \neq 0$ e $A \cdot v = \lambda v$ para algum $\lambda \in \mathbb{R}$, o qual recebe o nome de *autovalor* associado ao autovetor v . Além disso, o *polinômio característico* de A é por definição, $p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I_n)$. Segundo [17, Teorema 19.6, p. 252] para $\lambda \in \mathbb{R}$ ser um autovalor de A é necessário e suficiente que $p_A(\lambda) = 0$, donde concluímos que A possui no máximo n autovalores. No exemplo a seguir veremos uma maneira algébrica de se obter autovetores e autovalores de uma matriz.

Exemplo 3.2.1. Encontrar os autovalores e autovetores da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 8 & 16 \\ 4 & 1 & 8 \\ -4 & -4 & -11 \end{bmatrix}.$$

Para encontrar o polinômio característico de A , fazemos

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 5 - \lambda & 8 & 16 \\ 4 & 1 - \lambda & 8 \\ -4 & -4 & -11 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (5 - \lambda) \cdot \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 8 \\ -4 & -11 - \lambda \end{vmatrix} - 8 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 8 \\ -4 & -11 - \lambda \end{vmatrix} + 16 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 1 - \lambda \\ -4 & -4 \end{vmatrix} \\ &= (5 - \lambda) [(1 - \lambda)(-11 - \lambda) + 32] - 8(-44 - 4\lambda + 32) + 16(-16 + 4 - 4\lambda) \\ &= (5 - \lambda)(\lambda^2 + 10\lambda + 21) + 32\lambda + 12 \cdot 8 - 64\lambda - 12 \cdot 16 \\ &= -\lambda^3 - 5\lambda^2 + 29\lambda + 105 - 32\lambda - 96 \\ &= -\lambda^3 - 5\lambda^2 - 3\lambda + 9, \end{aligned}$$

logo $p_A(\lambda) = -\lambda^3 - 5\lambda^2 - 3\lambda + 9$. Como $p_A(\lambda)$ é mônico e com coeficientes inteiros, as possíveis raízes terão que ser divisores do termo independente, isto é, $\pm 1, \pm 3, \pm 9$. Facilmente vemos que 1 é raiz, então ao dividirmos $p_A(\lambda)$ por $(\lambda - 1)$ encontramos $p_A(\lambda) = -(\lambda - 1)(\lambda^2 + 6\lambda + 9) = -(\lambda - 1)(\lambda + 3)^2$. Portanto, os autovalores de A serão $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_2 = -3$, veja que -3 é uma raiz de multiplicidade 2, nesse caso, dizemos que $\lambda = -3$ é um autovalor de multiplicidade algébrica 2. Para encontrarmos o autovetor associado ao autovalor $\lambda = 1$, teremos que resolver o sistema homogêneo abaixo:

$$\begin{bmatrix} 4 & 8 & 16 \\ 4 & 0 & 8 \\ -4 & -4 & -12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Escalonando a matriz principal do sistema acima,

$$\begin{bmatrix} 4 & 8 & 16 \\ 4 & 0 & 8 \\ -4 & -4 & -12 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & -8 & -8 \\ 0 & 4 & 4 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Daí, o sistema 3.13 é equivalente a:

$$\begin{cases} v_1 + 2v_3 = 0 \\ v_2 + v_3 = 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

Portanto, segue de 3.14 que

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2v_3 \\ -v_3 \\ v_3 \end{bmatrix} = v_3 \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Como era esperado, qualquer múltiplo escalar do vetor $[-2 \ -1 \ 1]^T$ será um autovetor associado ao autovalor 1. O mesmo processo pode ser feito para $\lambda = -3$, nesse caso veremos que qualquer combinação linear dos vetores $[-1 \ 1 \ 0]^T$ e $[-2 \ 0 \ 1]^T$ será um autovetor associado ao autovalor -3 .

O leitor pode ter percebido no exemplo acima que encontrar autovalores e autovetores dessa forma é um processo bastante difícil, pois mesmo que o grau do polinômio característico seja relativamente pequeno, encontrar raízes algebricamente é um processo muito difícil. Ressaltamos também que nem sempre uma matriz admite autovalores, como mostra o exemplo a seguir.

Exemplo 3.2.2. Considere a matriz

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

A matriz acima representa uma rotação no plano, de ângulo θ no sentido anti-horário (ver Exemplo 1.1.1). Se $0 < \theta < \pi$, nenhum vetor pode ser levado em um múltiplo de si próprio, logo não existem autovalores para a matriz A .

Um resultado bastante conhecido da Álgebra Linear mostra que se A for uma matriz simétrica então sempre admitirá autovalores e autovetores, no próximo Teorema faremos uma demonstração desse resultado usando o Teorema do Multiplicador de Lagrange mas antes disso precisamos definir o *Quociente de Rayleigh* associado a matriz $A \in \mathbb{R}^{n^2}$ que será a função real

$$\mathfrak{R}(x) = \frac{\langle x, A \cdot x \rangle}{\langle x, x \rangle}, \quad (3.15)$$

onde $x \in \mathbb{R}^n$ é um vetor não nulo. Veja que dado $c \in \mathbb{R}$ não nulo pela linearidade do produto interno tem-se $\mathfrak{R}(cx) = \mathfrak{R}(x)$. O teorema a seguir relaciona o Quociente de Rayleigh com autovalores da matriz associada.

Teorema 3.2.1. *Considere $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica e seja $\lambda_m \in \mathbb{R}$ o menor valor assumido por $\mathfrak{R}(x)$, então λ_m é o menor autovalor de A e se v_m é um autovetor associado tem-se $\mathfrak{R}(v_m) = \lambda_m$. Um resultado inteiramente análogo vale para o maior valor assumido por $\mathfrak{R}(x)$.*

Demonstração. Considera a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \langle x, A \cdot x \rangle$, sabemos pelo Exemplo (1.2.2) que f é de classe C^1 , então usando o Teorema de Weierstrass podemos garantir que f assume um valor mínimo no compacto $S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n; \|x\| = 1\}$, além disso $S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n; g(x) = 0\}$, onde $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é a função dada por $g(x) = \langle x, x \rangle - 1$ que também é de classe C^1 pelo mesmo motivo que f . Assim, pelo Teorema do Multiplicador de Lagrange se $v_m \in S^{n-1}$ é um minimizador de f então existe um $\lambda_m \in \mathbb{R}$ tal que $\nabla f(v_m) = \lambda_m \nabla g(v_m)$, usando novamente o exemplo (1.2.2) tem-se $2A \cdot v_m = \lambda_m 2v_m$, isto é, $A \cdot v_m = \lambda_m v_m$. Suponha que $m \in \mathbb{R}$ satisfaz $m = f(v_m) \leq f(x)$ para todo $x \in S^{n-1}$, teremos

$$m = f(v_m) = \langle v_m, A \cdot v_m \rangle = \langle v_m, \lambda_m v_m \rangle = \lambda_m \|v_m\|^2 = \lambda_m. \quad (3.16)$$

Para mostrar que λ_m é o menor autovalor de A , considere $\lambda \in \mathbb{R}$ um autovalor qualquer de A , como qualquer múltiplo de um autovetor continua sendo um autovetor, podemos admitir sem perda de generalidade que existe $v \in S^{n-1}$ tal que $A \cdot v = \lambda v$ e usando (3.16) segue que $\lambda_m \leq f(v) = \lambda$. A demonstração está concluída, uma vez que $f(x) = \langle x, A \cdot x \rangle$ é a restrição de $\mathfrak{R}(x)$ a S^{n-1} e como observamos anteriormente $\mathfrak{R}(cx) = \mathfrak{R}(x)$ para todo $c \in \mathbb{R}$, não nulo. \square

De maneira geral, a demonstração acima mostra que qualquer ponto estacionário do problema a seguir:

$$\text{Minimizar } \mathfrak{R}(x) \text{ sujeito a } x \in S^{n-1}, \quad (3.17)$$

será um autovetor da matriz associada ao Quociente de Rayleigh. Em outras palavras, transformamos o processo de encontrar autovetor de uma matriz simétrica em um problema do tipo (3.1) que foi estudado na seção anterior e assim poder resolvê-lo numericamente.

Lembramos que a Lagrangiana do problema (3.17) é dada por $L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x)$, onde $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ são dadas por $f(x) = \langle x, A \cdot x \rangle$ e $g(x) = \langle x, x \rangle - 1$ que sabemos ser ambas de classe C^2 pelo Exemplo 1.2.5. Portanto, a aplicação $\nabla L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} = \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} = \mathbb{R}^{n+1}$, dada por $\nabla L(x, \lambda) = (\nabla f(x) - \lambda \nabla g(x), g(x))$ é de classe C^1 . Sendo assim, para aplicarmos o método de Newton para resolver a equação $\nabla L(x, \lambda) = 0$ precisamos calcular $\nabla^2 L(x, \lambda)$. Usando as regras de derivação tem-se

$$\nabla^2 L(x, \lambda) = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) - \lambda \nabla^2 g(x) & -\nabla g(x)^T \\ \nabla g(x) & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Sabemos que $\nabla f(x) = 2A \cdot x$ e $\nabla g(x) = 2x$, então segue do Exemplo (1.2.5) que

$$\nabla^2 L(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 2A - 2\lambda I_n & -2x^T \\ 2x & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

Sejam $x_k \in \mathbb{R}^n$ uma aproximação dada à solução \bar{x} do problema (3.17) e $\lambda_k \in \mathbb{R}$ uma aproximação ao multiplicador de Lagrange $\bar{\lambda}$ associado a \bar{x} . Pelo método de Newton a aproximação seguinte é dada por $(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) = (x_k, \lambda_k) + (v_1, v_2)$, onde $(v_1, v_2) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ é solução do sistema linear $\nabla^2 L(x_k, \lambda_k)(x, \lambda) = -\nabla L(x_k, \lambda_k)$. Usando 3.19 podemos reescrever esse sistema da seguinte forma:

$$\begin{aligned} (2A - 2\lambda_k I) \cdot x - 2\lambda_k x_k^T &= -2A \cdot x_k - 2\lambda_k x_k^T \\ 2\langle x_k, x \rangle &= -\langle x_k, x_k \rangle + 1, \end{aligned} \quad (3.20)$$

em relação a $(x, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$. Assim, o método de Newton para resolver o sistema de Lagrange associado à minimização do Quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária consiste no seguinte algoritmo.

Algoritmo 2.

Método de Newton aplicado ao Quociente de Rayleigh

Passo 0. Escolher um ponto inicial $(x_0, \lambda_0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ e tomar $k = 0$.

Passo 1. Calcular $(v_1, v_2) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, uma solução do sistema linear (3.20) e depois computar $(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) = (x_k, \lambda_k) + (v_1, v_2)$.

Passo 2. Tomar $k := k + 1$ e retornar ao passo 1.

É claro que a convergência do Algoritmo acima é consequência direta do Teorema 2.2.1 desde que $\nabla^2 L(\bar{x}, \bar{\lambda})$ seja invertível, o que veremos no lema a seguir:

Lema 3.2.1. *Seja $\bar{x} \in S^{n-1}$ a solução do problema (3.17) e $\bar{\lambda}$ o multiplicador de Lagrange associado, então a matriz $\nabla^2 L(\bar{x}, \bar{\lambda})$ dada em (3.19) é invertível.*

Demonstração. Seja (x, λ) um vetor arbitrário pertencente ao núcleo da matriz $(\nabla^2 L(\bar{x}, \bar{\lambda}))$. Então, usando (3.20) temos que

$$(2A - 2\bar{\lambda}I) \cdot x - 2\bar{\lambda}\bar{x}^T = 0 \quad (3.21)$$

$$2\langle \bar{x}, x \rangle = 0 \quad (3.22)$$

Fazendo o produto interno por x nos dois lados de (3.21), obtemos

$$\langle (2A - 2\bar{\lambda}I) \cdot x, x \rangle - 2\bar{\lambda}\langle \bar{x}, x \rangle = 0. \quad (3.23)$$

Usando (3.22) em (3.23) teremos

$$\langle (2A - 2\bar{\lambda}I) \cdot x, x \rangle = 0. \quad (3.24)$$

Como $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(\bar{x}, \bar{\lambda}) = \nabla^2 f(\bar{x}) - \bar{\lambda} \nabla^2 g(\bar{x}) = (2A - 2\bar{\lambda}I)$, pelo Teorema 3.1.5, para $x \neq 0$, teríamos $\langle (2A - 2\bar{\lambda}I) \cdot x, x \rangle > 0$, pois $\langle x, \nabla g(\bar{x}) \rangle = 0$ é satisfeito pela condição (3.22). Assim, por (3.24) teremos $x = 0$ e como $\bar{x} \neq 0$ segue de (3.21) que $\lambda = 0$. Mostramos que o núcleo da matriz $\nabla^2 L(\bar{x}, \bar{\lambda})$ é trivial, portanto invertível. \square

Atentando a natureza do problema em questão, se escolhermos uma aproximação x_0 suficientemente boa para \bar{x} , uma boa aproximação para λ_0 poderá ser obtida como veremos a seguir. Sabemos que $\nabla g(\bar{x}) = 2\bar{x} \neq 0$ e da condição $\nabla f(\bar{x}) = \bar{\lambda} \nabla g(\bar{x})$, obtemos

$$\langle \nabla g(\bar{x}), \nabla f(\bar{x}) \rangle = \bar{\lambda} \langle \nabla g(\bar{x}), \nabla g(\bar{x}) \rangle \Rightarrow \bar{\lambda} = \frac{\langle \nabla g(\bar{x}), \nabla f(\bar{x}) \rangle}{\langle \nabla g(\bar{x}), \nabla g(\bar{x}) \rangle}. \quad (3.25)$$

A função $\lambda : \mathbb{R}^n \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\lambda(x) = \frac{\langle 2x, 2A \cdot x \rangle}{\|2x\|^2},$$

é contínua já que o produto interno é. Logo tomando $\lambda_0 = \lambda(x_0) = (\|2x_0\|^2)^{-1} \langle 2x_0, 2A \cdot x_0 \rangle$, obtemos de (3.25) que $\lambda_0 = \lambda(x_0) \rightarrow \bar{\lambda} = \lambda(\bar{x})$ quando $x_0 \rightarrow \bar{x}$.

3.3 Sensibilidade da mão de um robô

O desenvolvimento de mãos robóticas é algo de grande importância na Engenharia. Segundo [12] o problema de sensibilidade da mão de um robô demanda um equilíbrio de forças que pode ser modelado matematicamente por um problema de Otimização conhecido como *optimal dextrous hand grasping*. Ainda, de acordo com [11], esse problema está associado a minimização da função $f(P) = \ln(\det P) - \text{tr}(P)$ sobre o cone de matrizes simétricas e definidas positivas. Nesta seção vamos estudar o método de Newton aplicado à minimização dessa função.

Seja $A \in \mathbb{R}^{n^2}$ dizemos que A é *definida (semi-definida) positiva* e representamos por $A > 0$ ($A \geq 0$) quando $\langle A \cdot v, v \rangle > 0$ ($\langle A \cdot v, v \rangle \geq 0$), para todo $v \in \mathbb{R}^n$. Lembramos que dado $A \in \mathbb{R}^{n^2}$ podemos representar $A = [a_{ij}]$, onde os índices $i, j = 1, \dots, n$, então A será definida positiva se para todo $v = (v_1, \dots, v_n) \neq 0$ em \mathbb{R}^n tivermos

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij} v_i v_j > 0. \quad (3.26)$$

Para cada $k = 1, \dots, n$ definimos o *menor principal* de ordem k da matriz A como sendo o determinante da submatriz $A_k = [a_{ij}], 1 \leq i, j \leq k$. Veremos a seguir que no caso de uma matriz simétrica temos um importante critério para verificar sua positividade.

Lema 3.3.1. *A fim de que uma matriz simétrica $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n^2}$ seja definida positiva é necessário e suficiente que seus menores principais sejam todos positivos.*

Demonstração. Veja uma demonstração em [17, Teorema 19.10, p. 262]. \square

Um subconjunto C de um espaço vetorial \mathbf{V} é um *cone*, se para cada vetor $x \in C$ e escalares $\alpha > 0$, o vetor $\alpha x \in C$. De acordo o lema anterior o subconjunto das matrizes simétricas e definidas positivas - SDP dado por $\mathbb{P}_{++} = \{A \in \mathbb{R}^{n^2} : A = A^T; A > 0\}$ é um cone. Assim como identificamos $\mathcal{M}(n \times n) = \mathbb{R}^{n^2}$ podemos identificar o espaço vetorial das matrizes simétricas $n \times n$ com $\mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$, pois uma matriz simétrica $n \times n$ fica determinada pelos seus elementos da diagonal principal e acima dela, os quais são em número de $1 + 2 + \dots + n = n(n+1)/2$.

Lema 3.3.2. *O conjunto \mathbb{P}_{++} é aberto no espaço $\mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$.*

Demonstração. Defina a função $F : \mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}} \rightarrow \mathbb{R}^n$ que associa a cada matriz simétrica $A = [a_{ij}]$ ao vetor

$$F(A) = \sum_{k=1}^n \det(A_k) e_k = (\det(A_1), \dots, \det(A_n)).$$

Sabemos que $H = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n : x_i > 0\}$ é o semi-espaço positivo que é um conjunto aberto em \mathbb{R}^n , também F é contínua pois suas funções coordenadas o são. Portanto, pelo Lema 3.3.1 $\mathbb{P}_{++} = F^{-1}(H)$ é um conjunto aberto em $\mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$. \square

Passamos agora a estudar a família de funções $f : \mathbb{P}_{++} \rightarrow \mathbb{R}$, dadas por

$$f(X) = a \ln(\det X) - b \operatorname{tr}(X), \quad (3.27)$$

onde $a/b > 0$. A diferenciabilidade de f resulta da Regra da Cadeia e de seu corolário (1.2.2). Nosso objetivo será resolver o problema:

$$\text{Minimizar } f(X) \text{ sujeito a } X \in \mathbb{P}_{++}. \quad (3.28)$$

Veremos abaixo que f é de classe C^2 logo pelo Teorema 3.1.2 os candidatos a solução desse problema serão as matrizes $X \in \mathbb{P}_{++}$ tal que $\nabla f(X) = 0$. Pelo Exemplo (1.2.6) tem-se $\nabla \operatorname{tr}(X) = I_n$ e pelo Exemplo (1.2.7), $\nabla \det(X) = (\operatorname{adj} X)^T$, além disso usando a Regra da Cadeia teremos

$$\nabla f(X) = a \frac{\nabla \det(X)}{\det X} - b \nabla \operatorname{tr}(X) \quad (3.29)$$

Note que quando uma matriz X é inversível temos $\operatorname{adj} X = (\det X)X^{-1}$, então de (3.29) concluimos que

$$\nabla f(X) = aX^{-1} - bI_n, \quad (3.30)$$

pois $X = X^T \Rightarrow (X^{-1})^T = (X^T)^{-1} = X^{-1}$. Resolvendo agora a equação $\nabla f(X) = 0$ temos:

$$aX^{-1} - bI_n = 0 \Rightarrow X^{-1} = \frac{b}{a}I_n \Rightarrow X = \frac{a}{b}I_n,$$

encontrando assim o único candidato à solução do problema 3.28 que denotaremos por \bar{X} , isto é, $\bar{X} = a/bI_n$.

Para mostrarmos que f é de classe C^2 , basta verificarmos que a inversão de matrizes é uma aplicação de classe C^1 , o que veremos no próximo Lema, mas antes relembramos que o conjunto $GL(\mathbb{R}^n) = \{X \in \mathbb{R}^{n^2}; \det X \neq 0\}$ formado pelas matrizes invertíveis é aberto em \mathbb{R}^{n^2} pelo mesmo argumento que usamos no Lema 3.3.2.

Lema 3.3.3. *A aplicação $g : GL(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$, dada por $g(X) = X^{-1}$ é de classe C^1 e sua derivada no ponto $A \in GL(\mathbb{R}^n)$ é a transformação linear $g'(A) : \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$, definida por $g'(A) \cdot V = -A^{-1}VA^{-1}$.*

Demonstração. Fazendo

$$g(A+V) - g(A) = -A^{-1}VA^{-1} + r(V), \quad (3.31)$$

vamos mostrar que $r(V) \rightarrow 0$ quando $V \rightarrow 0$. Multiplicando ambos os membros de (3.31), à esquerda, por $A+V$, obtemos

$$I_n - I_n - VA^{-1} = -VA^{-1} - (VA^{-1})^2 + (A+V)r(V), \quad (3.32)$$

de onde segue que

$$r(V) = (A+V)^{-1}(VA^{-1})^2, \quad (3.33)$$

pois sendo $GL(\mathbb{R}^n)$ aberto $A+V$ é inversível para toda matriz V com norma suficientemente pequena. Afirmamos que existe um número real $c > 0$ tal que, para todo $V \in \mathbb{R}^{n^2}$ que satisfaz $\|V\| \leq c$, implica que $A+V$ é invertível e $\|(A+V)^{-1}\| \leq 1/c$. Tome $c = 1/(2\|A^{-1}\|)$, dado $x \in \mathbb{R}^n$ podemos escrever $\|x\| = \|A^{-1}Ax\| \leq \|A^{-1}\|\|Ax\|$, o que implica $\|Ax\| \geq 2c\|x\|$. Então, se $\|V\| \leq c$ tem-se

$$\|(A+V) \cdot x\| = \|A \cdot x + V \cdot x\| \geq \|A \cdot x\| - \|V \cdot x\| \geq 2c\|x\| - c\|x\| = c\|x\|. \quad (3.34)$$

Como $c \neq 0$ (3.34) mostra que o núcleo de $A+V$ é trivial, isto é $A+V$ é invertível e $\|x\| = \|(A+V)(A+V)^{-1}x\| \geq c\|(A+V)^{-1}x\|$, donde $\|(A+V)^{-1}x\| \leq \|x\|/c$ e como $x \in \mathbb{R}^n$ é arbitrário segue que $\|(A+V)^{-1}\| \leq 1/c$. Assim, de (3.33) temos

$$\|r(V)\| \leq \|(A+V)^{-1}\|\|A^{-1}\|^2\|V\|^2 \leq \frac{1}{c}\|A^{-1}\|^2\|V\|^2, \quad (3.35)$$

mostrando que $\lim_{V \rightarrow 0} r(V)/\|V\| = 0$. Fixando $V \in \mathbb{R}^{n^2}$ vamos verificar que $\frac{\partial g}{\partial V} : GL(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$ dada por $\frac{\partial g}{\partial V}(X) = -X^{-1}VX^{-1}$ é contínua. Para isso, considere as aplicações $\phi : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$ dada por $\phi(X, Y) = XVY$ e $(g, g) : GL(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R}^{n^2}$

dada por $(g, g)(X) = (X^{-1}, X^{-1})$. A aplicação ϕ é contínua pois é bilinear e (g, g) também é contínua pois suas funções coordenadas são, como acabamos de ver, diferenciáveis então $\frac{\partial g}{\partial V} = \phi \circ (g, g)$ é composta de aplicações contínuas e logo contínua. Como V é arbitrário temos que g admite todas as derivadas parciais contínuas e logo de classe C^1 , como queríamos demonstrar. \square

Usando o Lema anterior encontramos $\nabla^2 f(X) \cdot V = -aX^{-1}VX^{-1}$. Dessa forma,

$$\langle \nabla f(\bar{X}) \cdot V, V \rangle = \left\langle -\frac{b^2}{a}V, V \right\rangle = -\frac{b^2}{a}\|V\|^2 \quad (3.36)$$

Consequentemente, caso $a, b < 0$ pelo Teorema 3.1.3 e a equação anterior temos que o ponto crítico \bar{X} é um mínimo local do problema (3.28). Analogamente, caso $a, b > 0$ a matriz \bar{X} será um máximo local.

Para resolvermos esse problema numericamente, vamos aplicar o método de Newton na equação não linear $\nabla f(X) = 0$. Resolvendo a equação de Newton $\nabla^2 f(X) \cdot V = -\nabla f(X)$ tem-se

$$-aX^{-1}VX^{-1} = -aX^{-1} + bI_n. \quad (3.37)$$

Multiplicando a última equação por X pela direita e pela esquerda teremos

$$-aV = -aX + bX^2 \Rightarrow V = X - \frac{b}{a}X^2. \quad (3.38)$$

Portanto, dado uma aproximação inicial X_k para \bar{X} , usando (3.38) obtemos que $X_{k+1} = X_k + X_k - b/aX_k^2$, o que nos dá o algoritmo do método de Newton para resolver o problema (3.28).

Algoritmo 3.

Método de Newton aplicado ao problema de robótica (3.28)

Passo 0. Escolher uma matriz inicial $X_0 \in \mathbb{P}_{++}$ e tomar $k = 0$.

Passo 1. Calcular $X_{k+1} \in \mathbb{R}^{\frac{n(n+1)}{2}}$, como sendo

$$X_{k+1} = 2X_k - \frac{b}{a}X_k^2.$$

Passo 2. Tomar $k := k + 1$ e retornar ao passo 1.

Como $\nabla^2 f(\bar{X})$ é inversível, segundo o Teorema 2.2.1 existe um $\delta_1 > 0$ tal que se $\|X_0 - \bar{X}\| < \delta_1$ o Algoritmo acima vai gerar uma sequência X_k bem definida que converge para a solução \bar{X} . Além disso pelo Lema 3.3.2, existe $\delta_2 > 0$ para o qual $\|X - \bar{X}\| < \delta_2$ implica que $X \in \mathbb{P}_{++}$. Portanto, tomando $\delta = \min\{\delta_1, \delta_2\}$, podemos afirmar que se $\|X_0 - \bar{X}\| < \delta$, o algoritmo vai gerar uma sequência viável convergente, isto é $X_k \in \mathbb{P}_{++}$ para todo k . No entanto, é importante destacar que a depender do ponto inicial $X_0 \in \mathbb{P}_{++}$ não podemos garantir que o algoritmo vai gerar uma sequência X_k viável. Por exemplo, tomando $X_0 = 3a/bI_n \in \mathbb{P}_{++}$ teremos $X_1 = 6a/bI_n - 9a/bI_n = -3a/bI_n$ que não pertence a \mathbb{P}_{++} pois $-3a/b < 0$. O Lema abaixo nos fornece uma classe de matrizes em que o algoritmo acima sempre irá produzir pontos viáveis. Mas, antes definimos para cada $i = 1, \dots, n$ a matriz $I_i \in \mathbb{R}^{n^2}$ dada por:

$$I_i = [\delta_{ij}], \text{ onde } \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Lema 3.3.4. *O Algoritmo 3 gera uma sequência de pontos viáveis no subconjunto $\sigma \subset \mathbb{P}_{++}$, dado por*

$$\sigma = \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i I_i ; 0 < \alpha_i < \frac{2a}{b} \right\}.$$

Demonstração. Seja $X_k \in \sigma$, então

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= 2X_k - \frac{b}{a}X_k^2 = 2 \sum_{i=1}^n \alpha_i I_i - \frac{b}{a} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i I_i \right)^2 = \sum_{i=1}^n 2\alpha_i I_i - \sum_{i=1}^n \frac{b}{a} \alpha_i^2 I_i \\ &= \sum_{i=1}^n \left(2\alpha_i - \frac{b}{a} \alpha_i^2 \right) I_i. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Veja que

$$0 < \alpha_i < 2\frac{a}{b} \Rightarrow 0 < \alpha_i^2 < 2\alpha_i \frac{a}{b} \Rightarrow 2\alpha_i \frac{a}{b} - \alpha_i^2 > 0 \Rightarrow 2\alpha_i - \frac{b}{a} \alpha_i^2 > 0.$$

Portanto, X_{k+1} dado em 3.39 é uma matriz simétrica e definida positiva, pois todos os seus autovalores são positivos. \square

Capítulo 4

Experimentos Numéricos

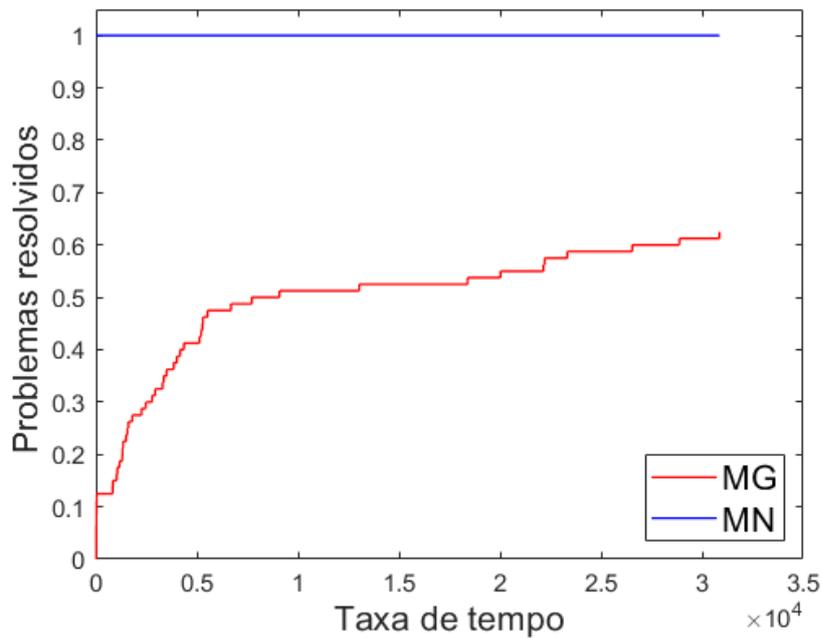
Neste capítulo vamos apresentar um estudo numérico a fim de comparar a eficiência do método de Newton comparado com o método do Gradiente para resolver os dois problemas apresentados no capítulo anterior. Embora seja esperado que o método de Newton tenha uma performance superior ao método do Gradiente, nosso objetivo é ilustrar o comportamento do método de Newton. Os experimentos numéricos foram realizados no software *MATLAB R2020b - trial use* em uma máquina com processador Intel Core i5 2.71 GHZ com 8.00 GB de memória RAM e sistema operacional Windows 10 Home 64 bits. Em todos os experimentos utilizamos o critério de parada $\|\nabla f(\bar{x})\| \leq 10^{-8}$, onde $\|\cdot\|$ é a norma Euclidiana. No caso de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n^2}$ temos que $\|A\| = \sqrt{\text{tr}(A^T A)}$. Utilizamos também como critério de parada o máximo de 10000 iterações. Gostaríamos de convencionar que ao escrevermos \mathfrak{R} estamos nos referindo ao Quociente de Rayleigh dado em (3.15), por outro lado f será a função dada em (3.27).

4.1 Quociente de Rayleigh na esfera unitária

Como vimos na seção anterior, o Algoritmo 2 representa o método de Newton aplicado ao problema de minimizar o Quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária. Para a apresentação dos testes numéricos chamaremos esse método por MN. Também implementamos o método do Gradiente para resolver o mesmo problema que MN e o denominaremos por MG. Nós aplicamos os algoritmos em uma coleção de problemas dados por várias dimensões diferentes para a matriz A definida no Quociente de Rayleigh.

No estudo em que fizemos, consideramos matrizes A simétricas de dimensões $n = 2, 3, 5, 8, 10, 50, 70, 100$. As matrizes foram geradas da forma $A = B \cdot B'$ onde $B = \text{rand}(n)$. Além disso, escolhemos 10 pontos iniciais para cada dimensão totalizando 80 problemas. Os pontos iniciais p foram escolhidos de maneira aleatória usando $p = \text{rand}(n, 1)$ além de satisfazerem $\|p - \bar{x}\| \leq 1$. Em geral, foi possível observar que MN é superior a MG em tempo de processamento. Veja na Figura 3 que MG consegue resolver pouco mais de

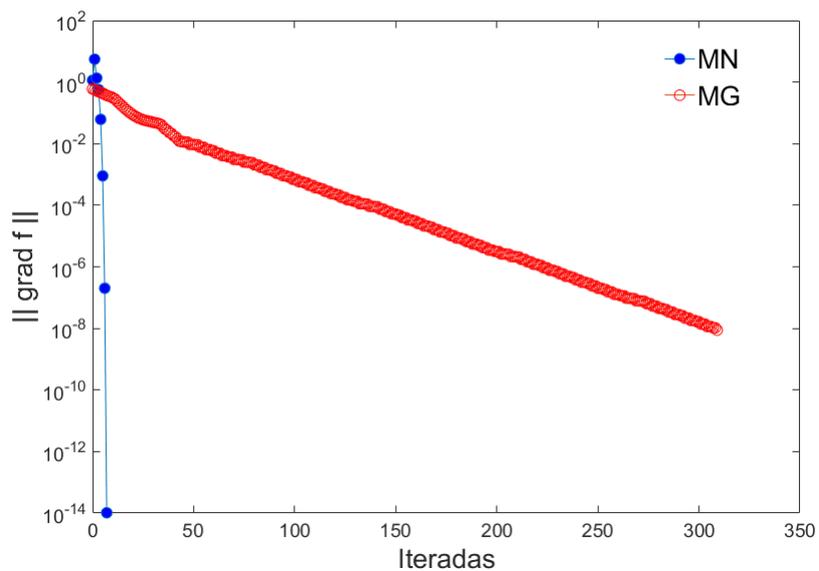
Figura 3



Performance profile considerando MN e MG para minimizar \mathfrak{R} sobre a esfera unitária em 80 problemas de dimensões $n = 2, 3, 5, 8, 10, 50, 70, 100$.

60%, enquanto MN resolve 100% dos problemas em menos tempo. Na Figura 4 podemos

Figura 4



Aplicando MN e MG para minimizar \mathfrak{R} sobre a esfera unitária com $n = 5$, a partir do mesmo ponto inicial.

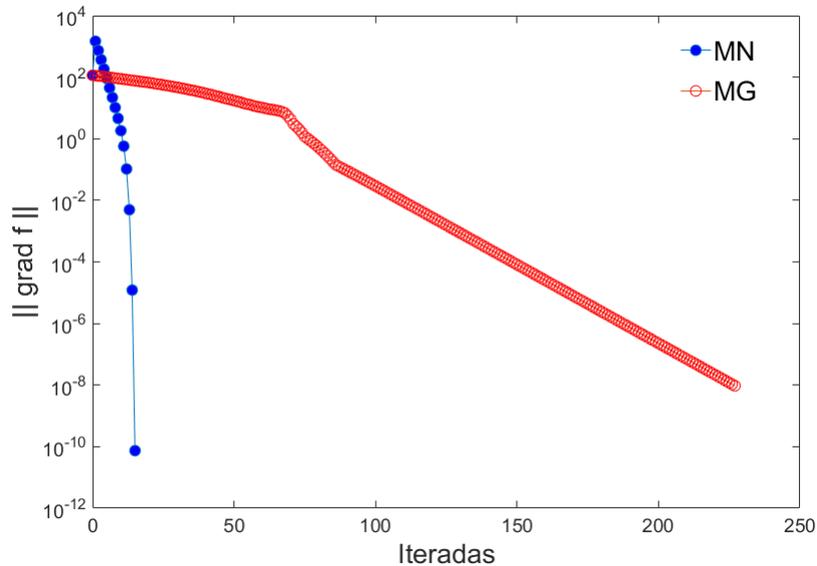
observar que mesmo MN tendo aumentando a norma do gradiente nas duas primeiras iterações, em seguida consegue convergir de forma muito rápida. Por outro lado, MG

diminui a norma do gradiente mais lentamente e conseqüentemente precisa de muitas iteradas a mais que MN para satisfazer o critério de parada.

4.2 Sensibilidade da mão de um robô.

O Algoritmo 3 representa o método de Newton para resolver o problema de minimizar f sobre o cone SDP e assim como na seção anterior representaremos esse algoritmo por MN. O algoritmo do método do Gradiente para resolver o mesmo problema também será representado por MG. Comparamos a performance dos métodos em um coleção de problemas, variando tanto a dimensão quanto os parâmetros a e b da função f . Podemos observar na Figura 5 que em MN a norma do gradiente diminui muito mais

Figura 5



Aplicando MN e MG para minimizar f sobre o cone com $n = 300$, $a/b = 1.5$ e $X_0 \in \sigma$ escolhido randomicamente.

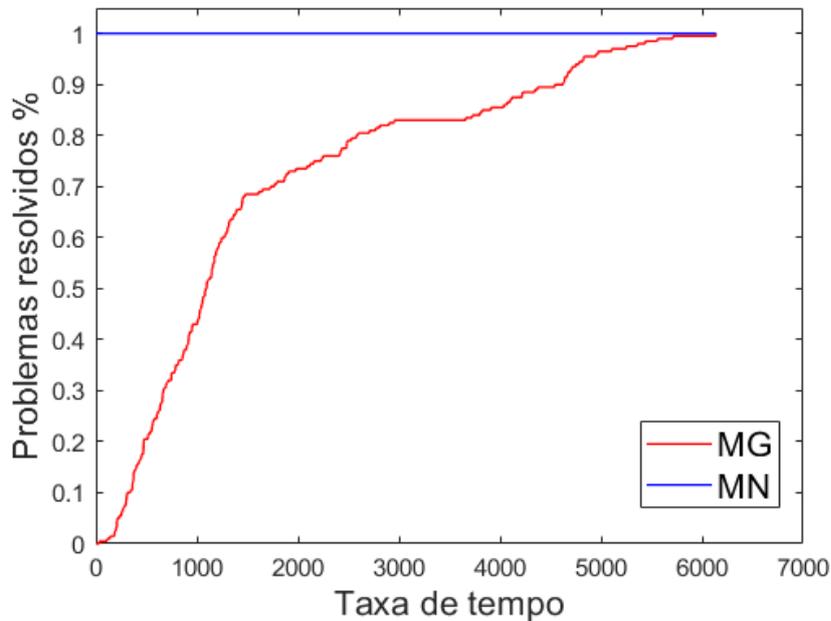
rápido do que MG, principalmente quando o método encontra a região de convergência dada no Teorema 2.2.1. Na Tabela 3, em que podemos ver com detalhes os dados do experimento apresentado na Figura 5, a sequência $p_k = \ln(r_k)/\ln(r_{k-1})$ onde $r_k = \|X_{k+1} - \bar{X}\|/\|X_k - \bar{X}\|$ converge para 2, comprovando numericamente a convergência quadrática da sequência gerada pelo Algoritmo 2. Por fim, escolhemos os valores 0.0001, 0.001, 0.1, 10 para a/b e dimensões $n = 2, 3, 5, 10, 50, 80, 100, 150, 200, 300$ para comparar a performance dos dois métodos. Para cada dimensão escolhemos 5 pontos iniciais P_0 pertencentes ao conjunto σ dado no Lema 3.3.4 e gerados de maneira aleatória da seguinte forma $C=2*(a/b)*rand(n,1)$; $P = diag(C)$. Em todos os nossos testes MN se mostrou superior a MG em tempo de processamento. Na Figura 6 podemos ver que apesar de ambos

Tabela 3

k	$\ \nabla f(X_k)\ $	$\ X_k - X\ $	p_k
0	115.0471437930882700	1.4989007914590018	—
1	1486.3938164650538000	1.4978023884242813	—
2	742.3378832173432300	1.4956079965129876	2.0000000000002034
3	370.3566567112735600	1.4912288528223954	1.999999999998115
4	184.4108997455978200	1.4825089943266647	2.000000000000484
5	91.4770350051081070	1.4652219455063060	1.999999999999727
6	45.0437427233334590	1.4312502330621895	2.000000000000200
7	21.8600813074978470	1.3656514864270477	1.999999999999949
8	10.3095926323725070	1.2433359882536035	1.999999999999973
9	4.5959740864144614	1.0305895864577097	2.000000000000031
10	1.8301824419293635	0.7080765971433820	2.000000000000000
11	0.5760402050191902	0.3342483116147674	2.000000000000004
12	0.1045066625607042	0.0744812892115485	1.999999999999982
13	0.0049432656406861	0.0036983082950761	2.000000000000200
14	0.0000121578376797	0.0000091183228303	1.9999999999977138
15	0.000000000739058	0.000000000554292	1.9999999721232928

Iterações de MN para minimizar f sobre o cone com $n = 300$, $a/b = 1.5$ e $X_0 \in \sigma$ escolhido aleatoriamente.

Figura 6



Performance profile considerando MN e MG para minimizar f sobre o cone em 200 problemas de dimensões $n = 2, 3, 5, 10, 50, 80, 100, 150, 200, 300$ para $a/b = 0.0001, 0.001, 0.1, 10$.

resolverem 100% dos problemas, MN possui um performance de tempo superior quando comparado a MG.

Capítulo 5

Considerações Finais

O método de Newton é uma poderosa ferramenta para aproximar soluções de equações, o que o torna um dos métodos numéricos mais utilizados para esse fim. Estudamos uma análise de convergência da qual vimos que a sequência gerada pelo método de Newton está bem definida e converge, desde que o ponto inicial esteja suficientemente próximo de uma solução, por essa razão a convergência é local. Para tal, foi essencial abordar resultados clássicos da Análise no \mathbb{R}^n que embasaram nossa análise de convergência. Quando acontece, a convergência do método se dá de maneira rápida, isto é, converge com ordem superlinear ou quadrática. Com o objetivo de constatar a eficiência do método de Newton, aplicamos ele para resolver os problemas de minimizar o Quociente de Rayleigh na esfera e uma função definida no cone de matrizes simétricas e definidas positivas a qual é um modelo matemático para medir a sensibilidade da mão de um robô.

Muitos problemas de Otimização sobre o cone SDP são resolvidos utilizando técnicas de otimização restrita. Ao nos restringirmos ao espaço das matrizes simétricas e demonstrado que o conjunto das matrizes definidas positivas é aberto nesse espaço, conseguimos tratar o problema de minimização no cone de maneira irrestrita. Dessa forma, evitamos a necessidade de fazer projeções de cada iterada gerada sobre o cone, o que sabemos ser um processo extremamente caro do ponto de vista computacional. Uma alternativa sem projeções pode ser encontrado no método de Newton em variedades Riemannianas, nesse caso o algoritmo gera uma sequência de pontos viáveis para qualquer ponto inicial, veja [18].

Por apresentar convergência local, muitas vezes é necessário acrescentar outras estratégias a este método para que a sequência gerada seja convergente para qualquer ponto inicial dado. Em um trabalho futuro, podemos estudar estratégias que permitem a globalização do método de Newton, mantendo sua velocidade de convergência superlinear ou quadrática.

Referências

- [1] MILIES, C. P. Breve história da álgebra abstrata. *II Bienal da Sociedade Brasileira de Matemática (www.bienasbm.ufba.br/M18.pdf)*, 2004. Citado na página 8.
- [2] GOLDSTINE, H. H. *A History of Numerical Analysis from the 16th through the 19th Century*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 2. Citado na página 8.
- [3] BARRICO, C. M. C. S. *Computação Científica*. [S.l.]: Universidade da Beira Interior. Citado na página 8.
- [4] RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. d. R. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. [S.l.]: Makron Books do Brasil, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 27.
- [5] MARTINEZ, J. M.; SANTOS, S. A. Métodos computacionais de otimização. *Colóquio Brasileiro de Matemática, Apostilas*, v. 20, 1995. Citado na página 9.
- [6] SOUZA, Q. E. de O. et al. Comparativo entre os métodos da secante, de newton e de newton utilizando derivada numérica. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 7, n. 1, 2020. Citado na página 9.
- [7] ORTEGA, J. M.; RHEINBOLDT, W. C. *Iterative solution of nonlinear equations in several variables*. [S.l.]: SIAM, 2000. Citado na página 9.
- [8] IZMAILOV, A.; SOLODOV, M. *Otimização*. 2. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 9, 36, 37 e 39.
- [9] RIBEIRO, A. A.; KARAS, E. W. *Otimização ao continua: Aspectos teóricos e computacionais*. São Paulo: Cengage Learning, 2013. Citado na página 9.
- [10] BALDINO, R. R.; SILVA, R. d. Introdução ao processamento de imagens ou aplicação da álgebra linear. *Revista de Matemática e Estatística*, v. 19, p. 123–144, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 40.
- [11] BUSS, M.; HASHIMOTO, H.; MOORE, J. B. Dextrous hand grasping force optimization. *IEEE transactions on robotics and automation*, IEEE, v. 12, n. 3, p. 406–418, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 44.

-
- [12] HELMKE, U.; HUPER, K.; MOORE, J. B. Quadratically convergent algorithms for optimal dextrous hand grasping. *IEEE Transactions on Robotics and Automation*, IEEE, v. 18, n. 2, p. 138–146, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 44.
- [13] LIMA, E. L. *Curso de Análise, volume 2, 6a. edição*. 11. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2018. ISBN 978-85-244-0448-1. Citado 6 vezes nas páginas 10, 12, 16, 19, 20 e 39.
- [14] LIMA, E. L. *Espaços métricos*. Rio de Janeiro: IMPA, 1983. v. 4. Citado na página 20.
- [15] WIKIPEDIANS, B. *Isaac Newton*. PediaPress. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=euo15NVqPBYC>>. Citado na página 25.
- [16] BRYAN, K.; LEISE, T. The 25,000,000,000 eigenvector: The linear algebra behind google. *SIAM review*, SIAM, v. 48, n. 3, p. 569–581, 2006. Citado na página 39.
- [17] LIMA, E. L. *Álgebra linear*. 9. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2016. ISBN 978-85-244-0420-7. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 45.
- [18] FERNANDES, T. A.; FERREIRA, O. P.; YUAN, J. On the superlinear convergence of newton’s method on riemannian manifolds. *Journal of Optimization Theory and Applications*, Springer, v. 173, n. 3, p. 828–843, 2017. Citado na página 53.

Apêndice A

Implementações

Fizemos todas as implementações a seguir na linguagem de programação do Matlab. O leitor interessado poderá reproduzir os códigos tanto no Matlab quanto no software livre Octave.

A.1 Método de Newton

Código do método de Newton para encontrar ponto crítico do Quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária.

```
% Método de Newton para encontrar ponto crítico do Quociente de Rayleigh na
% esfera unitária
%
% Dados de entrada
%
% kmax : número máximo de iterações
% tol : tolerância para norma do gradiente
% A : Matriz associada ao quociente de Rayleigh
% p : chute inicial

clc;
clear all;

tol= 1.0e-8;
kmax= 1000;
A = rand(n)
A = A'*A;
p = rand(n,1);
```

```
%Aproximação para o multiplicador de Lagrange
m = inv((2*p)'*(2*p))*(2*p)'*(2*A*p);

n = size(p,1);
%Matriz identidade de ordem n
I = eye(n);

%Gradiente da Lagrangiana
gradL = @(x,y) [2*A*x - y*2*x ; x'*x - 1];
%Hessiana da Lagrangiana
HessL= @(x,y) [2*A - y*I*2 , -2*x ; (2*x)' , 0];

k = 0;

fprintf(' Iterações          Norma do Gradiente\n');

%Processo iterativo
tic;
while true

ng = sqrt(gradL(p,m)'*gradL(p,m));
fprintf(' %5d   %23.12e\n',k,ng);

if ng <= tol
tempo = toc;
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente alcançada em:
      %12.8f segundos\n',tempo);
break;
end

if k > kmax
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente não alcançada.')
;
break;
end

k = k + 1;

%Construção da equação de Newton
```

```

K = HessL(p,m);
b = -gradL(p,m);

%Solução da equação de Newton
v = K\b;

%Atualização da nova iteração
p = p + v(1:n);
m = m + v(n+1);

end

```

Código do método de Newton para encontrar ponto crítico da função $f(X) = a \ln(\det X) - b \text{tr}(X)$ sobre o cone SDP.

```

% Método de Newton para encontrar ponto crítico da função f sobre o cone
%
% Dados de entrada
%
% kmax : número máximo de iterações
% tol : tolerância para norma do gradiente
% a : constante a na definição da função
% b : constante b na definição da função
% p : chute inicial

clc;
clear all;

tol= 1.0e-8;
kmax= 1000;
a = 3;
b = 2;
p = 2*a/b*rand(1)*eye(2);

n = size(p,1);
%Matriz identidade de ordem n
I = eye(n);

%Gradiente da função
gradf= @(x) a*inv(x)-b*I;

```

```
k = 0;

fprintf(' Iterações          Norma do Gradiente\n');

%Processo iterativo
tic;
while true

ng = sqrt(trace(gradf(p)'*gradf(p)));
fprintf(' %5d %23.12e\n',k,ng);

if ng <= tol
tempo = toc;
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente alcançada em:
      %12.8f segundos\n',tempo);
break;
end

if k > kmax
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente não alcançada.')
;
break;
end

k = k + 1;

%Solução da equação de Newton
v = p - (b/a)*(p^2);

%Atualização da nova iteração
p = p + v;

%Teste para verificar se as iteradas são SDP
[~,dp] = chol(p);
if dp ~= 0
fprintf('\n ::: O método não está produzindo pontos viáveis.');
```

```
end
```

A.2 Método do Gradiente

Código do método do Gradiente para encontrar ponto crítico do Quociente de Rayleigh sobre a esfera unitária.

```
% Método do Gradiente para encontrar ponto crítico do Quociente de Rayleigh na
% esfera unitária
%
% Dados de entrada
%
% kmax : número máximo de iterações
% tol : tolerância para norma do gradiente
% sigma : parâmetro da busca linear de Armijo
% A : Matriz associada ao Quociente de Rayleigh
% p : chute inicial

clc;
clear all;

tol= 1.0e-8;
kmax= 10000;
sigma = 5.0e-1;
B = rand(2);
A= B*B';
p = rand(2,1);

%Aproximação para o multiplicador de Lagrange
m = inv((2*p)'*(2*p))*(2*p)'*(2*A*p);

n = size(p,1);
I = eye(n);

%Gradiente da Lagrangiana
gradL = @(x) [2*A*x(1:n) - x(n+1)*2*x(1:n) ; x(1:n)'*x(1:n) -
1];
%Função auxiliar
```

```
phi = @(x) 1/2*gradL(x)'*gradL(x);
%Gradiente da função auxiliar
gradphi = @(x) [2*A - x(n+1)*I*2 , -2*x(1:n) ; 2*x(1:n)' , 0]'*
    gradL(x);

P=[p;m];
k = 0;

fprintf(' Iterações          Norma do Gradiente\n');

%Processo iterativo
tic;
while true

ng = sqrt(gradL(P)'*gradL(P));
fprintf(' %5d   %23.12e\n',k,ng);

if ng <= tol
tempo = toc;
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente alcançada em: %12.8
    f segundos\n',tempo);
break;
end

if k > kmax
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente não alcançada. ');
break;
end

k = k + 1;

%Busca linear de Armijo
alpha=1;
while true
iphi = phi(P - alpha*gradphi(P));
jphi = phi(P) - alpha*sigma*(gradphi(P)'*gradphi(P));
if iphi <= jphi
break
end
```

```

alpha=0.5*alpha;
end

%Atualização da nova iteração
P = P - alpha*gradphi(P);
p=P(1:n);
m=P(n+1);

end

```

Código do método do Gradiente para encontrar ponto crítico da função $f(X) = a \ln(\det X) - b \text{tr}(X)$ sobre o cone SDP.

```

% Método do Gradiente para encontrar ponto crítico da função f sobre o cone
%
% Dados de entrada
%
% kmax : número máximo de iterações
% tol : tolerância para norma do gradiente
% a : constante a na definição da função
% b : constante b na definição da função
% sigma : parâmetro da busca linear de Armijo
% p : chute inicial

clc;
clear all;

tol= 1.0e-8;
kmax= 1000;
a = 3;
b = 2;
sigma = 5.0e-1;
p = 2*a/b*rand(1)*eye(2);

n = size(p,1);
I = eye(n);

%Gradiente da função
gradf= @(x) a*inv(x)-b*I;
%Função auxiliar

```

```
phi = @(x) 1/2*trace(gradf(x)'*gradf(x));
%Gradiente da função auxiliar
gradphi = @(x) -a*inv(x)*gradf(x)*inv(x);

k = 0;

fprintf(' Iterações          Norma do Gradiente\n');

%Processo iterativo
tic;
while true

ng = sqrt(trace(gradf(p)'*gradf(p)));
fprintf(' %5d  %23.12e\n',k,ng);

if ng <= tol
tempo = toc;
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente alcançada em: %12.8
    f segundos\n',tempo);
break;
end

if k > kmax
fprintf('\n ::: Tolerância da Norma do Gradiente não alcançada. ');
break;
end

k = k + 1;

%Busca linear de Armijo
alpha=1;
while true
iphi = phi(p - alpha*gradphi(p));
jphi = phi(p) - alpha*sigma*trace(gradphi(p)'*gradphi(p));
if iphi <= jphi
break
end
alpha=0.5*alpha;
end
```

```
%Atualização da nova iteração
p = p - alpha*gradphi(p);

%Teste para verificar se as iteradas são SDP
[~,dp] = chol(p);
if dp ~= 0
    fprintf('\n ::: O método não está produzindo pontos viáveis. ');
    break
end

end
```