

174

UMA CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DOS MÉTODOS
QUASE-NEWTON

ESTELA MARIA ARAÚJO DE CARVALHO



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

C253c

24097/BC

CAMPINAS - SÃO PAULO
BRASIL

UMA CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DOS MÉTODOS
QUASE-NEWTON

ESTELA MARIA ARAÚJO DE CARVALHO

Orientador:

Prof. Dr. José Mário Martínez

Dissertação apresentada no Instituto
de Matemática, Estatística e Ciência
da Computação, como requisito parcial
para obtenção do título de Mestre em
Matemática Aplicada.

Novembro/1981

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

À memória de meu pai.

À minha mãe.

Ao Anecildo, Anestela, Laurinha e Cidinho.

AGRADECIMENTOS

Ao Martínez, pela orientação e pelo apoio nas horas mais difíceis.

Aos colegas, amigos e professores da UNICAMP, pelas palavras de incentivo.

À CAPES-PICD e UFRN, pelo apoio financeiro.

Aos meus irmãos e cunhados, por tudo.

Aos colegas e amigos da UFRN, por contribuírem com confiança para que eu pudesse chegar ao término deste trabalho.

À Célia, pelo trabalho de datilografia.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO.....	05
CAPÍTULO I - OS MÉTODOS BFGS e DFP.....	07
1.1 Derivação dos Métodos Quase-Newton.....	08
1.2 Fórmulas de Atualização das Matrizes.....	10
1.2.1 Fórmula de Correção de Posto 1 - Tipo B.....	11
1.2.2 Fórmula de Correção de Posto 1 - Tipo H.....	11
1.2.3 Fórmula de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS).....	11
1.2.4 Fórmula de Davidon-Fletcher-Powell (DFP).....	12
1.3 Dualidade.....	17
CAPÍTULO II - A FAMÍLIA DE FLETCHER.....	26
2.1 Definição.....	26
2.2 Propriedades.....	27
2.3 A Família Restrita de Fletcher.....	30
2.4 Uso da Fórmula de Correção de Posto 1.....	38
CAPÍTULO III - A BUSCA UNIDIMENSIONAL.....	42
3.1 Relaxação.....	42
3.2 Minimização Unidimensional.....	43
3.3 O Método de Interpolação Cúbica.....	46
CAPÍTULO IV - UM MÉTODO PARA MODIFICAR A FATORIZAÇÃO DE CHOLESKY	49
4.1 A Fatorização de Cholesky.....	49
4.2 A Modificação da Fatorização.....	51
4.3 A Modificação da Fatorização usando as Matrizes de Householder.....	54
CAPÍTULO V - RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA.....	61
5.1 A Convergência Superlinear.....	64
5.2 O Caso Quadrático.....	64
5.3 Outros Resultados de Convergência.....	66
CAPÍTULO VI - EXPERIÊNCIAS NUMÉRICAS.....	69
6.1 Introdução.....	69
6.2 Funções-Teste Utilizadas nas Experiências.....	70
6.3 Análise dos Testes.....	71
BIBLIOGRAFIA.....	82

INTRODUÇÃO

Já é bastante sabido que os algoritmos para minimização, baseados no fato de que uma função real, diferenciável em \mathbb{R}^n , pode ser aproximada por uma função quadrática numa vizinhança de um mínimo, são usualmente mais bem sucedidos quando se trata de resolver um problema de *minimização de funções sem restrições*. Em tais algoritmos, um dos mais importantes aspectos que podemos considerar, é a estimação da matriz hessiana da função a ser minimizada, através do cálculo do gradiente. Os métodos que utilizam este procedimento são chamados de *algoritmos de métrica variável*.

O primeiro e talvez mais conhecido algoritmo de métrica variável foi proposto por Davidon [4] em 1959. Em 1962, foi simplificado por Fletcher e Powell, passando a ser chamado de método DFP, e pertencente à classe dos métodos quase-Newton. Posteriormente, em 1970, surgiu um outro método do tipo quase-Newton com o nome de BFGS, sugerido por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno.

Um outro algoritmo que também aproxima uma função não linear por uma quadrática surgiu em 1952, com o nome de *métodos de gradientes conjugados*. Inicialmente, ele foi sugerido por Stiefel, para ser usado na solução de equações lineares. Posteriormente, foi aplicado pela primeira vez para otimização sem restrições, por Fletcher e Reeves [8] em 1964.

Neste trabalho, objetivamos fazer um estudo teórico dos métodos de tipo quase-Newton, para minimização sem restrições, a fim de que o mesmo venha oferecer subsídios para todos aqueles que desejem um maior aprofundamento no que diz respeito a litera-

tura especializada sobre o assunto aqui abordado.

Dessa forma, no Capítulo I, mostramos como surgiram os métodos quase-Newton e como obter as fórmulas de atualização das matrizes. Neste Capítulo, apresentamos também a equivalência existente entre os métodos de "tipo B" e de "tipo H".

No Capítulo II, definimos uma família contínua de fórmulas de tipo H, chamada de *Família de Fletcher*. Mostramos as suas propriedades e provamos alguns teoremas relativos à *Propriedade de Estabilidade de Fletcher*.

O uso do algoritmo quase-Newton com relaxação é mostrado no Capítulo III, onde apresentamos alguns dos vários critérios existentes para se fazer a busca unidimensional desses métodos.

A modificação da fatorização de Cholesky é estudada no Capítulo IV onde, através de exemplos, mostramos como fazê-la e sugerimos a modificação da fatorização usando as matrizes de Householder.

O Capítulo V foi dedicado à convergência desses métodos. Apresentamos alguns teoremas que garantem a convergência superlinear, como também convergência local. A convergência quadrática é também, aqui, mostrada.

Mas, neste trabalho, o nosso interesse não ficou apenas numa pesquisa teórica sobre esses métodos.

Objetivando uma melhoria na eficiência da busca unidimensional, usada na SUBROUTINE VA13A, através de um conjunto de experiências numéricas, tentamos elucidar qual é a melhor maneira de escolhermos certo parâmetro que aparece nessa busca unidimensional, mostrada no Capítulo VI, onde apresentamos também todos os resultados computacionais obtidos.

CAPÍTULO IOS MÉTODOS BFGS E DFP

Os métodos quase-Newton tratam de resolver dois tipos de problemas:

(a) Resolução de sistemas não-lineares sem usar jacobianos.

Seja $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $F \in C^1(\mathbb{R}^n)$.

O problema é achar $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que $F(x^*) = 0$, sem usar derivadas, ou seja, fazendo apenas avaliações da função.

(b) Minimizações sem restrições.

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$.

O problema é achar mínimos locais de f sem usar derivadas segundas.

Neste trabalho, estaremos abordando apenas o tipo (b), que é um caso particular de (a).

Denotaremos

$$g(x) = \nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \end{bmatrix} f(x)$$

para ser o gradiente e $G(x) = ((\partial/\partial x_1 \ \partial x_j) f(x))$ o hessiano.

Também usaremos as notações:

$$f'(x) = \nabla f(x)^T$$

$$f''(x) = \nabla^2 f(x) = G(x)$$

1.1) DERIVAÇÃO DOS MÉTODOS QUASE-NEWTON:

Tomemos o problema de minimizar $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ sem restrições. Desenvolvendo $f(x)$, por Taylor, numa vizinhança de $x^0 \in \mathbb{R}^n$, temos:

$$f(x) = f(x^0) + f'(x^0)(x-x^0) + \frac{1}{2}(x-x^0)^T f''(x^0)(x-x^0) + o(\|x-x^0\|^2)$$

ou seja,

$$f(x) \approx f(x^0) + f'(x^0)(x-x^0) + \frac{1}{2}(x-x^0)^T f''(x^0)(x-x^0)$$

Se f fosse uma função quadrática, o hessiano seria constante, portanto, f poderia ser escrito como:

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

onde $X = x - x^0$, $b = f'(x^0)$, $G = f''(x^0)$ e $c = f(x^0)$.

Se, além disso, fosse $G > 0$ (positiva definida), o único mínimo de f em \mathbb{R}^n seria o ponto

$$x^* = x^0 - G^{-1} \cdot g(x^0) \quad (1.1.1)$$

com x^0 um ponto arbitrário.

A fórmula (1.1.1) dá origem ao método de Newton no caso geral:

$$x^{k+1} = x^k - G(x^k)^{-1} g(x^k)$$

Os métodos quase-Newton, na versão "ingênua", têm a seguinte fórmula:

$$x^{k+1} = x^k - B_k^{-1} g(x^k) \quad (1.1.2)$$

ou, alternativamente,

$$x^{k+1} = x^k - H_k g(x^k) \quad (1.1.3)$$

Aos métodos que usam a fórmula (1.1.2), chamamos de "tipo B" e aos que usam a fórmula (1.1.3) de "tipo H".

As características essenciais desses métodos são:

- (a) A matriz B_k é, em algum sentido, uma aproximação de $G(x^k)$ (ou H_k de $G(x^k)^{-1}$).
- (b) A matriz B_{k+1} (H_{k+1}) se obtém da matriz B_k , através de uma fórmula recursiva que envolve somente avaliação de g em x^k .

Agora, vamos determinar em que sentido B_k (H_k) é uma aproximação de $G(x^k)$ ($G(x^k)^{-1}$). Para isso, necessitamos de duas propriedades do hessiano, no caso quadrático, que são:

Se $y, z \in \mathbb{R}^n$, $\Delta x = y - z$ e $\Delta g = g(y) - g(z)$, então:

$$(1) \quad G \cdot \Delta x = \Delta g$$

$$(2) \quad G^{-1} \cdot \Delta g = \Delta x$$

Para conservar essas propriedades, os métodos quase-Newton requerem que suas matrizes satisfaçam a:

$$(1) \quad B_{k+1} \cdot (x^{k+1} - x^k) = g(x^{k+1}) - g(x^k)$$

$$(2) \quad H_{k+1} \cdot (g(x^{k+1}) - g(x^k)) = x^{k+1} - x^k$$

que chamaremos de equações matriciais fundamentais (E.M.F.).

Faremos aqui, uma esquematização dos algoritmos dos dois tipos:

TIPO B:

Dados: x^0 , B_0 , $k = 0$.

Passo 1:

$$\text{Calcular } x^{k+1} = x^k - B_k^{-1} \cdot g(x^k)$$

Passo 2:

$$\delta = x^{k+1} - x^k, \quad \gamma = g(x^{k+1}) - g(x^k)$$

$$\text{Obter } B_{k+1} \text{ tal que } B_{k+1} \delta = \gamma$$

Passo 3:

$$k = k+1, \text{ vá para o passo 1.}$$

TIPO H:

$$\text{Dados: } x^0, B_0, k = 0$$

Passo 1:

$$\text{Calcular } x^{k+1} = x^k - H_k \cdot g(x^k)$$

Passo 2:

$$\delta = x^{k+1} - x^k, \quad \gamma = g(x^{k+1}) - g(x^k)$$

$$\text{Obter } H_{k+1} \text{ tal que } H_{k+1} \gamma = \delta$$

Passo 3:

$$k = k+1, \text{ vá para o passo 1.}$$

1.2) FÓRMULAS DE ATUALIZAÇÃO DAS MATRIZES:

A seguir, mostraremos as fórmulas mais utilizadas para se obter as matrizes dos métodos quase-Newton. Para fixar idéias, usaremos as fórmulas DFP e BFGS para mostrarmos, através de um exemplo numérico, a aplicação dos algoritmos dados no parágrafo anterior.

$$\text{Sejam } \delta = x^{k+1} - x^k \text{ e } \gamma = g(x^{k+1}) - g(x^k)$$

1.2.1) Fórmula de Correção de Posto 1 - Tipo B:

Seja $B_{k+1} = B_k + \Delta B$, onde ΔB é uma matriz de posto 1.

Usando a E.M.F. temos:

$$B_{k+1} \cdot \delta = \gamma$$

$$(B_k + \Delta B) \cdot \delta = \gamma$$

$$\Delta B \cdot \delta = \gamma - B_k \cdot \delta$$

que é satisfeita pondo,

$$\Delta B = \frac{(\gamma - B_k \delta) z^T}{z^T \cdot \delta}, \quad \forall z \in \mathbb{R}^n \text{ tal que } z^T \delta \neq 0.$$

É necessário que B_{k+1} seja simétrica, então:

$$\Delta B = \frac{(\gamma - B_k \delta) (\gamma - B_k \delta)^T}{(\gamma - B_k \delta)^T \cdot \delta}$$

1.2.2) Fórmula de Correção de Posto 1 - Tipo H:

Procedendo como na demonstração anterior, temos:

$$\Delta H = \frac{(\delta - H_k \gamma) (\delta - H_k \gamma)^T}{(\delta - H_k \gamma)^T \cdot \gamma}$$

1.2.3) Fórmula de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS):

É uma fórmula de correção de posto 2 - tipo B. Seja

$$B_{k+1} = B_k + \Delta B_1 + \Delta B_2$$

Usando a E.M.F., temos:

$$B_{k+1} \cdot \delta = \gamma$$

$$(B_k + \Delta B_1 + \Delta B_2) \cdot \delta = \gamma$$

$$\Delta B_1 \cdot \delta + \Delta B_2 \cdot \delta = \gamma - B_k \delta$$

que é satisfeita se,

$$\Delta B_1 \cdot \delta = \gamma \quad \text{e} \quad \Delta B_2 \cdot \delta = -B_k \delta$$

e que se cumprem, pondo

$$\Delta B_1 = \frac{\gamma \cdot \gamma^T}{\gamma^T \cdot \delta} \quad \text{e} \quad \Delta B_2 = \frac{-B_k \delta z^T}{z^T \cdot \delta}$$

$\forall \gamma, z \in \mathbb{R}^n$ tais que: $\gamma^T \cdot \delta \neq 0$ e $z^T \cdot \delta \neq 0$.

Para conservar a simetria temos:

$$\Delta B_1 = \frac{\gamma \cdot \gamma^T}{\gamma^T \cdot \delta} \quad \text{e} \quad \Delta B_2 = \frac{-B_k \delta \delta^T B_k}{\delta^T B_k \delta}$$

Então,

$$B_{k+1} = B_k + \frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta} - \frac{B_k \delta \delta^T B_k}{\delta^T B_k \delta} \quad (1.2.1)$$

1.2.4) Fórmula de Davidon-Fletcher-Powell (DFP):

Esta fórmula de correção é também de posto 2 - tipo H.

Procedemos analogamente, como na BFGS, resultando:

$$\Delta H_1 = \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} \quad \text{e} \quad \Delta H_2 = \frac{-H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma}$$

Então,

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \quad (1.2.2)$$

EXEMPLO 1: Minimizar a função $f(x) = \frac{3}{2} (x_1)^2 + \frac{1}{2} (x_2)^2 - x_1 x_2 - 2x_1$

Usaremos para isto, os algoritmos da seção 1.1 e as fórmulas BFGS e DFP.

$$\text{Sejam } x^0 = (-2, 4)^T, \quad B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad k = 0$$

$$g(x) = \begin{pmatrix} 3x_1 - x_2 - 2 \\ x_2 - x_1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad g(x^0) = \begin{pmatrix} -12 \\ 6 \end{pmatrix}$$

1) Usando a BFGS:

$$x^1 = x_0 - B_0^{-1} g(x^0) = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -12 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ -2 \end{pmatrix}$$

onde

$$f(x^1) = 152 \quad \text{e} \quad g(x^1) = \begin{pmatrix} 30 \\ -12 \end{pmatrix}$$

Calculando,

$$\delta = x^1 - x^0 = \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \gamma = g(x^1) - g(x^0) = \begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta} = \frac{\begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix} (42, -18)}{(42, -18) \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} 1764 & -756 \\ -756 & 324 \end{pmatrix}}{612} = \begin{pmatrix} 2.882352 & -1.235294 \\ -1.235294 & 0.529411 \end{pmatrix}$$

$$\frac{B_0 \delta \delta^T B_0}{\delta^T B_0 \delta} = \frac{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix} (12, -6) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}{(12, -6) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} 144 & -72 \\ -72 & 36 \end{pmatrix}}{180} = \begin{pmatrix} 0.8 & -0.4 \\ -0.4 & 0.2 \end{pmatrix}$$

obtemos,

$$B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2.882352 & -1.235294 \\ -1.235294 & 0.529411 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.8 & -0.4 \\ -0.4 & 0.2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 3.082352 & -0.835294 \\ -0.835294 & 1.329411 \end{pmatrix}$$

e

$$B_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0.391003 & +0.245674 \\ +0.245674 & 0.936575 \end{pmatrix}$$

Fazendo $k = 1$ temos ,

$$x^2 = \begin{pmatrix} 10 \\ -2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.391003 & +0.245674 \\ +0.245674 & 0.936575 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 30 \\ -12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.217998 \\ 1.86868 \end{pmatrix}$$

onde

$$f(x^2) = -0.740783 \quad e \quad g(x^2) = \begin{pmatrix} -0.214686 \\ 0.650682 \end{pmatrix}$$

Calculando,

$$\delta = x^2 - x^1 = \begin{pmatrix} -8.782002 \\ 3.86868 \end{pmatrix} \quad \gamma = \begin{pmatrix} -30.214686 \\ 12.650682 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\gamma \cdot \gamma^T}{\gamma^T \delta} = \begin{pmatrix} 2.904757 & -1.216202 \\ -1.216202 & 0.509215 \end{pmatrix}$$

$$\frac{B_1 \delta \delta^T B_1}{\delta^T B_1 \delta} = \begin{pmatrix} 2.920486 & -1.202732 \\ -1.202732 & 0.495313 \end{pmatrix} \quad e \quad B_2 = \begin{pmatrix} 3.066623 & -0.848764 \\ -0.848764 & 1.34331 \end{pmatrix}$$

obtemos,

$$B_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.395204 & 0.249708 \\ 0.249708 & 0.902206 \end{pmatrix}$$

Fazendo $k = 2$, chegamos a

$$x^3 = \begin{pmatrix} 1.140362 \\ 1.341239 \end{pmatrix}$$

onde

$$f(x^3) = -0.960122 \quad e \quad g(x^3) = \begin{pmatrix} 0.079847 \\ 0.200877 \end{pmatrix}$$

Calculando

$$\delta = \begin{pmatrix} -0.077636 \\ -0.527441 \end{pmatrix} \quad e \quad \gamma = \begin{pmatrix} 0.294527 \\ -0.449805 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta} = \begin{pmatrix} 0.404639 & -0.617969 \\ -0.617969 & 0.943770 \end{pmatrix}$$

$$\frac{B_2 \delta \delta^T B_2}{\delta^T B_2 \delta} = \begin{pmatrix} 0.136267 & -0.417803 \\ -0.417803 & 1.281009 \end{pmatrix}$$

chegamos a,

$$B_3 = \begin{pmatrix} 3.334995 & -1.04883 \\ -1.04883 & 1.006071 \end{pmatrix} \quad e \quad B_3^{-1} = \begin{pmatrix} 0.446170 & 0.465072 \\ 0.465072 & 1.478804 \end{pmatrix}$$

que é uma boa aproximação para a inversa da hessiana

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

2) Usando a DFP:

$$x^1 = x^0 - H_0 g(x^0) = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -12 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ -2 \end{pmatrix}$$

onde

$$f(x^1) = 152 \quad e \quad g(x^1) = \begin{pmatrix} 30 \\ -12 \end{pmatrix}$$

Calculemos,

$$\delta = \begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix} \quad e \quad \gamma = \begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} = \frac{\begin{pmatrix} 12 \\ -6 \end{pmatrix} (12, -6)}{(12, -6) \begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0.235294 & -0.117647 \\ -0.117647 & 0.058823 \end{pmatrix}$$

$$\frac{H_0 \gamma \gamma^T H_0}{\gamma^T H_0 \gamma} = \frac{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix} (42, -18) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}{(42, -18) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 42 \\ -18 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0.844827 & -0.362068 \\ -0.362068 & 0.155172 \end{pmatrix}$$

para obtermos

$$H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.235294 & -0.117647 \\ -0.117647 & 0.058823 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.844827 & -0.362068 \\ -0.362068 & 0.155172 \end{pmatrix}$$

e

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0.390467 & 0.244421 \\ 0.244421 & 0.903651 \end{pmatrix}$$

Fazendo $k = 1$ obtemos,

$$x^2 = \begin{pmatrix} 10 \\ -2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.390467 & 0.244421 \\ 0.244421 & 0.903651 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 30 \\ -12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.219042 \\ 1.511182 \end{pmatrix}$$

onde,

$$f(x^2) = -0.909347 \quad e \quad g(x^2) = \begin{pmatrix} 0.145944 \\ 0.29214 \end{pmatrix}$$

Calculemos agora,

$$\delta = \begin{pmatrix} -8.780958 \\ 3.511182 \end{pmatrix} \quad e \quad \gamma = \begin{pmatrix} -29.854056 \\ 11.70786 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} = \begin{pmatrix} 0.254258 & -0.101668 \\ -0.101668 & 0.040653 \end{pmatrix} \quad e \quad \frac{H_1 \gamma \gamma^T H_1}{\gamma^T H_1 \gamma} = \begin{pmatrix} 0.256994 & -0.095922 \\ -0.095922 & 0.035803 \end{pmatrix}$$

e teremos,

$$H_2 = \begin{pmatrix} 0.387731 & 0.238675 \\ 0.238675 & 0.908501 \end{pmatrix}$$

Fazendo $k = 2$ temos,

$$x^3 = \begin{pmatrix} 1.092729 \\ 1.21094 \end{pmatrix} \quad \text{com} \quad f(x^3) = -0.984415$$

$$e \quad g(x^3) = \begin{pmatrix} 0.067247 \\ 0.118211 \end{pmatrix}.$$

Calculando H_3 obtemos,

$$H_3 = \begin{pmatrix} 0.501958 & 0.499134 \\ 0.499134 & 1.500402 \end{pmatrix}$$

que é uma boa aproximação da inversa hessiana G^{-1} .

1.3) DUALIDADE:

As fórmulas de correção apresentadas no parágrafo anterior, sugerem a dualidade entre as fórmulas de "tipo B" e as de "tipo H". Para isso, o princípio a ser usado poderia ser [7]: "a cada fórmula de tipo B, corresponde uma de tipo H, que será obtida a partir da substituição dos BÊS por HAGAS, dos DELTAS

por GAMAS e dos GAMAS por DELTAS". A recíproca é também naturalmente certa, logo, as fórmulas DFP e BFGS são duais.

Porém, seja $H_k = B_k^{-1}$ e suponhamos que, por exemplo, as B_{k+1} são geradas pela fórmula BFGS e as H_{k+1} pela dual DFP. É, então, $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$?

Através de um exemplo numérico, mostraremos que isso nem sempre acontece.

EXEMPLO 2: Tomemos,

$$B_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \delta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \gamma = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Usando a BFGS para determinar B_1 , temos:

$$\Delta B_1 = \frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 9 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \Delta B_2 = -\frac{B_0 \delta \delta^T B_0}{\delta^T B_0 \delta} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B_1 = B_0 + \Delta B_1 + \Delta B_2 = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 13 & 7 \\ 7 & 23 \end{pmatrix}$$

$$B_1^{-1} = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} 23 & -7 \\ -7 & 13 \end{pmatrix}$$

Calculando H_1 através da DFP, temos:

$$\Delta H_1 = \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \Delta H_2 = -\frac{H_0 \gamma \gamma^T H_0}{\gamma^T H_0 \gamma} = -\frac{1}{13} \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 9 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = H_0 + \Delta H_1 + \Delta H_2 = \frac{1}{65} \begin{pmatrix} 58 & -17 \\ -17 & 33 \end{pmatrix}$$

Portanto, $B_1^{-1} \neq H_1$.

Assim, um método de tipo B e seu dual tipo H não são o mesmo método.

A seguir, veremos que dado um método de tipo B(H) é possível encontrar um método de tipo H(B) que lhe seja equivalente, mas não o seu dual. Para isso, basta obter as fórmulas para a sequência das inversas $B_k^{-1}(H_k^{-1})$ quando são dadas as matrizes $B_k(H_k)$.

Essas fórmulas são obtidas através do uso da fórmula de Sherman-Morrison [6], mostrada no teorema 3.1. Antes, vamos apresentar um lema que será usado na demonstração do teorema.

LEMA - Sejam $v, w \in \mathbb{R}^n$. Então:

$$\det(I + v w^T) = 1 + w^T v$$

PROVA: Seja $P = I + v w^T$ e admitamos que $v \neq 0$, porque para $v = 0$, o resultado é trivial. Então, algum autovetor de P é ou ortogonal a w ou um múltiplo de v.

Se o autovetor é ortogonal a w, o autovalor é unitário e se é paralelo a v, então o autovalor é $1 + w^T v$.

TEOREMA 3.1: Sejam $u, v \in \mathbb{R}^n$ e A uma matriz $n \times n$, não-singular. Então, $A + uv^T$ é não-singular se, e somente se,

$$\sigma = 1 + v^T A^{-1} u \neq 0$$

e neste caso

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{\sigma} \cdot A^{-1} uv^T A^{-1} \quad (1.3.1)$$

PROVA: Do lema anterior, segue-se que $A + uv^T$ é não singular se, e somente se, $\sigma \neq 0$.

Agora, vamos mostrar que se verifica (1.3.1).

$$\begin{aligned}
 (A+uv^T)(A+uv^T) &= (A+uv^T) \left(A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1+v^T A^{-1}u} \right) \\
 &= A \cdot A^{-1} + uv^T A^{-1} - \frac{AA^{-1}uv^T A^{-1} + u(v^T A^{-1}u)v^T A^{-1}}{1+v^T A^{-1}u} \\
 &= I + \frac{uv^T A^{-1} + uv^T A^{-1}v^T A^{-1}u - uv^T A^{-1} - uv^T A^{-1}v^T A^{-1}u}{1+v^T A^{-1}u} \\
 &= I + 0 = I.
 \end{aligned}$$

EXEMPLO 2: Se as H_k se geram pela fórmula DFP, vamos mostrar como podemos obter a fórmula que gera as H_k^{-1} .

Temos que aplicar duas vezes a fórmula (1.3.1); primeiro, para ΔH_1 , e depois para ΔH_2 .

Então:

$$(H_k + \Delta H_1)^{-1} = \left(H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} \right)^{-1} \quad (1.3.2)$$

Tomemos $u = \frac{\delta}{\delta^T \gamma}$, $v = u$, $A = H_k$, então temos:

$$v^T A^{-1} u = \frac{\delta^T H_k^{-1} \delta}{\delta^T \gamma} \quad \text{e} \quad A^{-1} u v^T A^{-1} = \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma}$$

Assim, fazendo as substituições em (1.3.2), temos:

$$(H_k + \Delta H_1)^{-1} = H_k^{-1} - \frac{1}{\delta^T H_k^{-1} \delta} \cdot \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma} = H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta}$$

Repetindo o uso da fórmula (1.3.1) quando agregamos ΔH_2 , temos:

$$(H_k + \Delta H_1 + \Delta H_2)^{-1} = \left(H_k + \Delta H_1 - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \right)^{-1} \quad (1.3.3)$$

Tomemos,

$$u = \frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma}, \quad v = H_k \gamma \quad e \quad A = H_k + \Delta H_1$$

Então temos:

$$\begin{aligned} v^T A^{-1} u &= \gamma^T H_k \left(H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} \right) \left(\frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right) = \\ &= \left(\gamma^T I - \frac{\gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} \right) \left(\frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right) = -1 - \frac{\gamma^T \delta \delta^T \gamma}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma} \\ A^{-1} u v^T A^{-1} &= \left(H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} \right) \left(\frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \right) \left(H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} \right) = \\ &= \left(-\frac{\gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T H_k}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma} \right) \left(H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} \right) = \\ &= -\frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma} + \frac{\gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{\gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} - \end{aligned}$$

$$-\frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)}$$

Assim, fazendo as substituições em (1.4.3), temos:

$$\begin{aligned} (H_k + \Delta H_1 + \Delta H_2)^{-1} &= H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} - \frac{1}{1 - 1 + \frac{\gamma^T \delta \delta^T \gamma}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma}} \cdot \\ &\cdot \left[\frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma} + \frac{\gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{\gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} \right. \\ &\left. - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} \right] = \\ &= H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} - \frac{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} \cdot \\ &\cdot \left[\frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma} + \frac{\gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{\gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} \right. \\ &\left. - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} \right] = \\ &= H_k^{-1} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta} + \frac{(\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta) \gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} - \frac{H_k^{-1} \delta \delta^T \gamma \gamma^T}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} \\ &- \frac{\gamma \gamma^T \delta \delta^T H_k^{-1}}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} + \frac{H_k^{-1} \delta (\delta^T \gamma \gamma^T \delta) \delta^T H_k^{-1}}{(\gamma^T \delta \delta^T \gamma) (\delta^T \gamma + \delta^T H_k^{-1} \delta)} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= H_k^{-1} - \frac{\gamma(\gamma^T \delta) \delta^T H_k^{-1}}{(\gamma^T \delta) \delta^T \gamma} - \frac{H_k^{-1} \delta (\delta^T \gamma) \gamma^T}{(\gamma^T \delta) \delta^T \gamma} + \frac{\gamma (\delta^T \gamma) \gamma^T}{(\gamma^T \delta) \delta^T \gamma} + \\
&+ \frac{\gamma \delta^T H_k^{-1} \delta \gamma^T}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} = H_k^{-1} - \frac{\gamma \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k^{-1} \delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} + \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma} + \\
&+ \frac{\gamma \delta^T H_k^{-1} \delta \gamma^T}{\gamma^T \delta \delta^T \gamma} = H_k^{-1} - \frac{\gamma \delta^T H_k^{-1}}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k^{-1} \delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} + \\
&+ \left(1 + \frac{\delta^T H_k^{-1} \delta}{\delta^T \gamma} \right) \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma}
\end{aligned}$$

ou ainda,

$$H_{k+1}^{-1} = (H_k + \Delta H_1 + \Delta H_2)^{-1} = \left(I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} \right) H_k^{-1} \left(I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} \right) + \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma} \quad (1.3.4)$$

Assim, dada uma fórmula de tipo B (H) e a recorrência para as matrizes B_k^{-1} (H_k^{-1}); se agora, chamarmos $H_k = B_k^{-1}$ ($B_k = H_k^{-1}$), teremos que para todo k valem:

$$H_k \gamma = \delta \quad \text{ou} \quad B_k \delta = \gamma .$$

Definimos então, um método de tipo H (B) que, este sim, é equivalente ao original, isto é, gera a mesma sucessão de pontos. Porém, desta vez, este novo método tem um dual que é do tipo B (H) como o original e que é equivalente ao dual do original. Para melhor entendermos isto, observemos o diagrama 1.

A seguir, relacionaremos as fórmulas (1.2.1) e (1.2.2) e suas equivalentes:

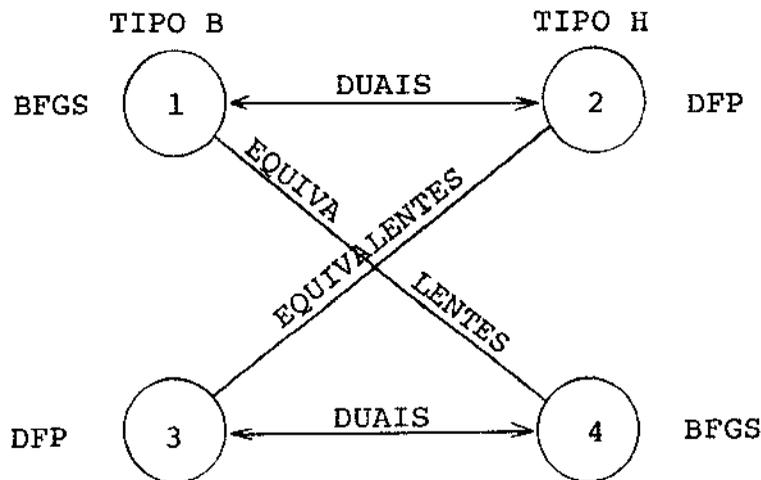
$$(1) \quad B_{k+1} = B_k + \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma} - \frac{B_k \delta \delta^T B_k}{\delta^T B_k \delta} \quad (\text{BFGS})$$

$$(2) \quad H_{k+1} = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \quad (\text{DFP})$$

$$(3) \quad B_{k+1} = \left(I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} \right) B_k \left(I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} \right) + \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma} \quad (\text{DFP})$$

$$(4) \quad H_{k+1} = \left(I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} \right) H_k \left(I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} \right) + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} \quad (\text{BFGS}) \quad (1.3.5)$$

Em diagrama, temos:



(Diagrama 1)

EXEMPLO 3: Se usarmos os mesmos dados do exemplo 2 e calcularmos B_{k+1}^{-1} pela fórmula 4 teremos:

$$B_1^{-1} = H_1 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2,3 \end{pmatrix}}{(1,1) \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1,1 \end{pmatrix}}{(1,1) \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}} \right) + \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1,1 \end{pmatrix}}{(1,1) \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}}$$

$$B_1^{-1} = H_1 = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{3}{5} \\ -\frac{2}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{2}{5} \\ -\frac{3}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \end{pmatrix} = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} 23 & -7 \\ -7 & 13 \end{pmatrix}$$

CAPÍTULO II

A FAMÍLIA DE FLETCHER

2.1) DEFINIÇÃO:

Vamos mostrar uma família contínua de fórmulas de tipo H [7] .

Seja (H_{k+1}^0) uma recorrência por certo tipo de fórmulas e (H_{k+1}^1) outra. Sabemos que para todo k , se $\delta = x^{k+1} - x^k$ e $\gamma = g(x^{k+1}) - g(x^k)$,

$$H_{k+1}^0 \gamma = \delta \quad \text{e} \quad H_{k+1}^1 \gamma = \delta$$

Agora, se $\theta \in \mathbb{R}$ e definimos:

$$H_{k+1}^\theta = \theta H_{k+1}^1 + (1-\theta) H_{k+1}^0 \quad (2.1.1)$$

temos que:

$$H_{k+1}^\theta \gamma = \theta H_{k+1}^1 \gamma + (1-\theta) H_{k+1}^0 \gamma = \theta \delta + (1-\theta) \delta = \delta$$

ou seja, H_{k+1}^θ satisfaz a EMF.

A fórmula (2.1.1) define uma família contínua de fórmulas de tipo H dependendo do parâmetro θ .

DEFINIÇÃO: A família de Fletcher é definida tomando-se H_{k+1}^0 como sendo a recorrência DFP (1.2.2) e H_{k+1}^1 a BFGS (1.3.5) ou seja, a equivalente de seu dual.

Assim, temos que:

$$H_{k+1}^\theta = (1-\theta) H_{k+1}^0 + \theta H_{k+1}^1$$

onde

$$H_{k+1}^0 = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma}$$

$$H_{k+1}^1 = H_k - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \left(1 + \frac{\gamma^T H_k \gamma}{\delta^T \gamma} \right) \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

2.2) PROPRIEDADES:

Daremos aqui algumas propriedades da família de Fletcher.

PROPRIEDADE 1: A família de Fletcher pode ser escrita da seguinte maneira

$$H_{k+1}^\theta = H_{k+1}^0 + \theta v v^T \quad (2.2.1)$$

onde

$$v = (\gamma^T H_k \gamma)^{1/2} \left(\frac{\delta}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right)$$

e $\gamma^T H_k \gamma \neq 0$ e H_{k+1}^0 como na definição 2.

PROVA:

$$H_{k+1}^0 = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma}$$

$$H_{k+1}^1 = H_k - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \left(1 + \frac{\gamma^T H_k \gamma}{\delta^T \gamma} \right) \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

e fazemos a substituição em (2.1.1). Assim, temos que:

$$H_{k+1}^\theta = (1-\theta) \left(H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \right) + \theta \left[H_k - \frac{\delta \delta^T H_k}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \left(1 + \frac{\gamma^T H_k \gamma}{\delta^T \gamma} \right) \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= H_k + \frac{\delta\delta^T}{\delta^T\gamma} - \frac{H_k\gamma\gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} - \theta H_k - \frac{\theta\delta\delta^T}{\delta^T\gamma} + \theta \frac{H_k\gamma\gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \theta H_k - \\
&- \theta \frac{\delta\gamma^T H_k}{\delta^T\gamma} - \theta \frac{H_k\gamma\delta^T}{\delta^T\gamma} + \theta \frac{\delta\delta^T}{\delta^T\gamma} + \theta \frac{\delta\gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T\gamma)^2} = \\
&= H_k + \frac{\delta\delta^T}{\delta^T\gamma} - \frac{H_k\gamma\gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \theta \left(\frac{H_k\gamma\gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} - \frac{\delta\gamma^T H_k}{\delta^T\gamma} - \right. \\
&- \left. \frac{H_k\gamma\delta^T}{\delta^T\gamma} + \frac{\delta\gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T\gamma)^2} \right) = \tag{2.2.2} \\
&= H_{k+1} + \theta v v^T
\end{aligned}$$

pois

$$\begin{aligned}
v v^T &= (\gamma^T H_k \gamma)^{1/2} \left(\frac{\delta}{\delta^T\gamma} - \frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right) \left(\frac{\delta^T}{\delta^T\gamma} - \frac{\gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} \right) (\gamma^T H_k \gamma)^{1/2} = \\
&= \gamma^T H_k \gamma \left(\frac{\delta\delta^T}{(\delta^T\gamma)^2} - \frac{\delta\gamma^T H_k}{\delta^T\gamma \gamma^T H_k \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T\gamma \gamma^T H_k \gamma} + \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{(\gamma^T H_k \gamma)^2} \right) = \\
&= \frac{\delta\gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T\gamma)^2} - \frac{\delta\gamma^T H_k}{\delta^T\gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T\gamma} + \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma}
\end{aligned}$$

PROPRIEDADE 2: A H-fórmula de correção de posto 1 pertence à família de Fletcher com $\theta = \frac{\delta^T\gamma}{\delta^T\gamma - \gamma^T H_k \gamma}$.

PROVA: Seja H_{k+1}^θ como em (2.2.2), isto é:

$$H_{k+1}^{\theta} = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \theta \left(\frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \frac{\delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T \gamma)^2} \right)$$

e fazemos a substituição de θ , temos então:

$$\begin{aligned} H_{k+1}^{\theta} &= H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{\delta^T \gamma}{\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma} \left(\frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \frac{\delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T \gamma)^2} \right) = \\ &= H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \frac{\delta^T \gamma H_k \gamma \gamma^T H_k}{(\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma) \gamma^T H_k \gamma} - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma} - \\ &\quad - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma} + \frac{\delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma) \delta^T \gamma} = \\ &= H_k + \frac{\delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma) - H_k \gamma \gamma^T H_k \delta^T \gamma (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma)}{\delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma)} + \\ &\quad + \frac{-(\delta \gamma^T H_k + H_k \gamma \delta^T) \delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma + \delta (\gamma^T H_k \gamma)^2 \delta^T}{\delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma)} = \\ &= H_k + \frac{\delta^T \delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T \gamma - \delta (\gamma^T H_k \gamma)^2 \delta^T - H_k \gamma \gamma^T H_k (\delta^T \gamma)^2 + H_k \gamma \gamma^T H_k \delta^T \gamma \gamma H_k \gamma}{\delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma)} + \\ &\quad + \frac{(\delta^T \gamma)^2 H_k \gamma \gamma^T H_k - \delta \gamma^T H_k \delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma - H_k \gamma \delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma \delta^T + \delta (\gamma^T H_k \gamma)^2 \delta^T}{\delta^T \gamma \gamma^T H_k \gamma (\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma)} = \end{aligned}$$

$$= H_k + \frac{\delta \delta^T + H_k \gamma \gamma^T H_k - \delta \gamma^T H_k - H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma - \gamma^T H_k \gamma}$$

Portanto,

$$H_{k+1}^\theta = H_k + \frac{(\delta - H_k \gamma) (\delta - H_k \gamma)^T}{(\delta - H_k \gamma)^T \gamma}$$

que é a H-fórmula de correção de posto 1.

PROPRIEDADE 3: ΔH_k^θ é uma matriz de posto ≤ 2 cujas colunas são combinações de δ e $H_k \gamma$.

PROVA: Por (2.2.1),

$$\Delta H_k^\theta = (\gamma^T H_k \gamma) \left(\frac{\delta}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right) \left(\frac{\delta}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma}{\gamma^T H_k \gamma} \right)^T$$

Então,

$$\Delta H_k^\theta \cdot \gamma = \lambda_1 \delta + \lambda_2 H_k \gamma, \quad \forall \gamma \in \mathbb{R}^n.$$

Assim, o subespaço gerado pelas colunas de ΔH_k^θ está contido no subespaço gerado por $\{\delta, H_k \gamma\}$. Portanto, a tese vale.

PROPRIEDADE 4: Se H_{k+1}^0 é positiva definida, então, H_{k+1}^θ é positiva definida para todo $\theta \geq 0$.

PROVA: De $H_{k+1}^\theta = H_{k+1}^0 + \theta v v^T$, verifica-se diretamente.

2.3) A FAMÍLIA RESTRITA DE FLETCHER:

Vejamos que a não singularidade de H_k^0 implica na não

singularidade de H_{k+1}^0 para todo $\theta \geq 0$.

TEOREMA 2.3.1: Se $\delta^T \gamma > 0$ e H_k^0 é positiva definida, então H_{k+1}^0 é positiva definida para todo $\theta \geq 0$.

PROVA: Sabemos que $H_k^0 > 0 \iff (H_k^0)^{-1} > 0$, porém

$$(H_{k+1}^0)^{-1} = \left(I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} \right) (H_k^0)^{-1} \left(I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} \right) + \frac{\gamma \gamma^T}{\delta^T \gamma}$$

Logo, se $v \neq 0$, $v^T (H_{k+1}^0)^{-1} v > 0$.

Então $(H_{k+1}^0)^{-1}$ é positiva definida $\implies H_{k+1}^0$ é positiva definida $\implies H_{k+1}^0 = H_{k+1}^0 + \theta v v^T > 0$, $\forall \theta \geq 0$.

A seguir, mostraremos através de uma Propriedade e de alguns teoremas, boas razões para restringirmos mais ainda a família de Fletcher ($0 \leq \theta \leq 1$) [7]. A família com esta nova restrição, chamaremos Família Restrita de Fletcher (FRF).

PROPRIEDADE DE ESTABILIDADE DE FLETCHER

Sejam $K_k = G^{1/2} H_k G^{1/2}$ e $z = G^{1/2} \delta$. Então os autovalores de K_{k+1} estão, ao menos, tão perto de 1 como os de K_k .

Usaremos o seguinte lema [17], na demonstração dos próximos teoremas.

LEMA: Se A é simétrica com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ e $A^* = A + \sigma v v^T$ tem autovalores $\lambda_1^* \geq \lambda_2^* \geq \dots \geq \lambda_n^*$, então, se $\sigma > 0$, é: $\lambda_1^* \geq \lambda_1 \geq \lambda_2^* \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n^* \geq \lambda_n$. Se $\sigma < 0$, é:

$$\lambda_1 \geq \lambda_1^* \geq \lambda_2 \geq \lambda_2^* \geq \dots \geq \lambda_n \geq \lambda_n^* .$$

TEOREMA 2.3.2: A fórmula DFP aplicada a uma quadrática cumpre a Propriedade de Estabilidade de Fletcher.

PROVA: Consideremos a fórmula DFP,

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma}$$

aplicada a uma quadrática e escrevamos

$$H_k = G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}}, \quad \delta = G^{-\frac{1}{2}} z \quad \text{e} \quad \gamma = G \delta = G \cdot G^{-\frac{1}{2}} z = G^{\frac{1}{2}} z$$

Substituindo esses valores na fórmula acima, temos:

$$\begin{aligned} G^{-\frac{1}{2}} K_{k+1} G^{-\frac{1}{2}} &= G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z z^T G^{\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T G^{\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z} = \\ &= G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} K_k z z^T K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T K_k z} \end{aligned}$$

Simplificando, chegamos a

$$K_{k+1} = K_k + \frac{z z^T}{z^T z} - \frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z}$$

Suponhamos que os autovalores de K_k sejam $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$

Tomemos

$$\bar{K} = K_k - \frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z}$$

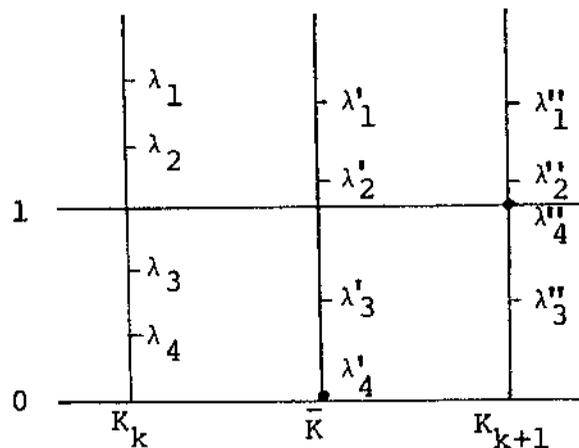
Observamos que \bar{K} tem um autovalor zero com autovetor z , pois,

$$\bar{K}z = K_k z - \frac{K_k z z^T K_k z}{z^T K_k z} = K_k z - K_k z = 0$$

Suponhamos agora que os outros autovalores sejam $\lambda'_1 \geq \lambda'_2 \geq \dots \geq 0$. Como $z^T K_k z > 0$, pelo lema anterior, temos que $\lambda'_1 \geq \lambda_1 \geq \lambda'_2 \geq \dots \geq 0$.

Agora, ao agregarmos $\frac{z z^T}{z^T z}$, o autovalor zero passa a ser 1, e os outros continuam inalterados. Assim, esses outros autovalores se comportam como os de K_k .

Vejamos, através de um gráfico, como isso se apresentaria:



(Diagrama 2)

Portanto, o que podemos dizer é que "os autovalores de K_{k+1} estão ao menos tão perto de 1 quanto os de K_k ", todavia, o ideal seria que K_k se parecesse com I , pois assim sendo,

a Propriedade de Estabilidade de Fletcher se consideraria desejável.

Vamos agora provar esse mesmo teorema, usando a BFGS.

TEOREMA 2.3.3: A fórmula BFGS aplicada a uma quadrática cumpre a Propriedade de Estabilidade de Fletcher.

PROVA: Consideremos a fórmula BFGS

$$H_{k+1} = \begin{pmatrix} I - \frac{\delta \gamma^T}{\delta^T \gamma} \end{pmatrix} H_k \begin{pmatrix} I - \frac{\gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} \end{pmatrix} + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma}$$

aplicada a uma quadrática e tomemos

$$H_k = G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}}, \quad \delta = G^{-\frac{1}{2}} z \quad \text{e} \quad \gamma = G^{\frac{1}{2}} z,$$

teremos então:

$$\begin{aligned} G^{-\frac{1}{2}} H_{k+1} G^{-\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} I - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{\frac{1}{2}}}{z^T G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z} \end{pmatrix} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} I - \frac{G^{\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z} \end{pmatrix} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T G^{-\frac{1}{2}} G^{\frac{1}{2}} z} = \\ &= \begin{pmatrix} I - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \end{pmatrix} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} I - \frac{G^{\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \end{pmatrix} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} = \\ &= \begin{pmatrix} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I - \frac{G^{\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \end{pmatrix} + \\ &+ \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \right) \left(I - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} \right) + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} = \\
&= G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} + \\
&+ \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T K_k G^{-\frac{1}{2}} G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{(z^T z)^2} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} = \\
&= G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} K_k z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} - \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T K_k G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z} + \\
&+ \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T K_k z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{(z^T z)^2} + \frac{G^{-\frac{1}{2}} z z^T G^{-\frac{1}{2}}}{z^T z}
\end{aligned}$$

Simplificando, chegamos a:

$$K_{k+1} = K_k - \frac{K_k z z^T}{z^T z} - \frac{z z^T K_k}{z^T z} + \frac{z z^T K_k z z^T}{(z^T z)^2} + \frac{z z^T}{z^T z}$$

Procedendo da mesma forma como no teorema (2.3.1), to
mamos

$$\bar{K} = K_k - \frac{K_k z z^T}{z^T z} - \frac{z z^T K_k}{z^T z} + \frac{z z^T K_k z z^T}{(z^T z)^2}$$

e verificamos que tem um autovalor zero com autovetor z e esse -
autovalor passa a ser 1 quando acrescentamos o termo $\frac{z z^T}{z^T z}$ e os

outros continuam inalterados.

TEOREMA 2.3.4: Todas as fórmulas da FRF ($0 \leq \theta \leq 1$) cumprem a Propriedade de Estabilidade de Fletcher.

PROVA: Consideremos a fórmula (2.2.2)

$$H_{k+1}^{\theta} = H_k + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} + \theta \left(\frac{H_k \gamma \gamma^T H_k}{\gamma^T H_k \gamma} - \frac{\delta \gamma^T H_k}{\delta^T \gamma} - \frac{H_k \gamma \delta^T}{\delta^T \gamma} + \frac{\delta \gamma^T H_k \gamma \delta^T}{(\delta^T \gamma)^2} \right)$$

aplicada a uma quadrática e substituamos $H_k = G^{-\frac{1}{2}} K_k G^{-\frac{1}{2}}$, $\delta = G^{-\frac{1}{2}} z$ e $\gamma = G^{\frac{1}{2}} z$. Então:

$$K_{k+1}^{\theta} = K_k + \frac{z z^T}{z^T z} - \frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z} + \theta \left(\frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z} - \frac{z z^T K_k}{z^T z} - \frac{K_k z z^T}{z^T z} + \frac{z z^T K_k z z^T}{(z^T z)^2} \right)$$

Se tomarmos

$$\bar{K} = K_k - \frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z} + \theta \left(\frac{K_k z z^T K_k}{z^T K_k z} - \frac{z z^T K_k}{z^T z} - \frac{K_k z z^T}{z^T z} + \frac{z z^T K_k z z^T}{(z^T z)^2} \right)$$

ela terá um autovalor zero com autovetor z e, ao agregarmos o termo $\frac{z z^T}{z^T z}$, esse autovalor passará a ser 1 e os outros autovalores continuam inalterados.

EXEMPLO: Consideremos o problema de minimizar

$$f(x) = \frac{3}{2} (x_1)^2 + \frac{1}{2} (x_2)^2 + x_1 x_2 - 2x_1 \quad \text{para } x^0 = (-1, 1)$$

$$g(x) = \begin{pmatrix} 3x_1 + x_2 - 2 \\ x_1 + x_2 \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

1) Usando a DFP temos:

$$H_1^0 = \begin{pmatrix} 0.433333 & -0.3 \\ -0.3 & 0.9 \end{pmatrix} \quad H_2^0 = \begin{pmatrix} 0.395019 & -0.257648 \\ -0.257648 & 0.940932 \end{pmatrix}$$

$$K_1^0 = G^{1/2} H_1^0 G^{1/2} = \begin{pmatrix} 1.160769 & 0.83094 \\ 0.830939 & 0.733333 \end{pmatrix}$$

Os autovalores de K_1^0 são: $\lambda_1 = 1.805035$; $\lambda_2 = 0.08907$.

Agora,

$$K_2^0 = G^{1/2} H_2^0 G^{1/2} = \begin{pmatrix} 1.233471 & 0.921218 \\ 1.070773 & 0.820655 \end{pmatrix}$$

e seus autovalores são

$$\lambda'_1 = 2.041469$$

$$\lambda'_2 = 0.012657$$

Podemos ver que estes estão próximos aos autovalores de K_1^0 .

2) Usando a BFGS temos:

$$H_1^1 = \begin{pmatrix} 0.444444 & -0.333333 \\ -0.333333 & 1 \end{pmatrix}$$

e

$$H_2^1 = \begin{pmatrix} 0.411357 & -0.300554 \\ -0.300554 & 1.051247 \end{pmatrix}$$

$$K_1^1 = G^{1/2} H_1^1 G^{1/2} = \begin{pmatrix} 1.178621 & 0.859117 \\ 0.859117 & 0.777778 \end{pmatrix}$$

Resolvendo a equação

$$\lambda^2 - 1.956399\lambda + 0.17863 = 0$$

temos que os autovalores de K_1^1 são:

$$\lambda_1 = 1.860381 \quad \lambda_2 = 0.096018$$

Agora,

$$K_2^1 = G^{1/2} H_2^1 G^{1/2} = \begin{pmatrix} 1.244167 & 0.942609 \\ 0.942609 & 0.861496 \end{pmatrix}$$

e resolvendo a equação

$$(\lambda')^2 - 2.105663\lambda' + 0.183333 = 0$$

temos que os autovalores de K_2^1 são:

$$\lambda'_1 = 2.014664 \quad \lambda'_2 = 0.090999$$

Podemos ver, também, que estes estão próximos aos autovalores de K_1^1 .

2.4) USO DA FÓRMULA DE CORREÇÃO DE POSTO 1:

Esta fórmula tem uma propriedade interessante para funções quadráticas.

PROPRIEDADE: Se H_n está definida e não se faz singular, então $H_n = G^{-1}$, logo, x^{n+1} é o mínimo de f .

PROVA: Suponhamos que x^0, x^1, \dots, x^k se geram por

$$x^{j+1} = x^j - \lambda_j H_j g(x^j)$$

e as H_j por
$$H_{j+1} = \frac{(\delta - H_j \gamma) (\delta - H_j \gamma)^T}{(\delta - H_j \gamma)^T \gamma} + H_j$$

e que $\delta = x^{j+1} - x^j$, $\gamma = g(x^{j+1}) - g(x^j)$ e vale $H_{j+1} \gamma = \delta$.

Agora, se $\delta' = x^{p+1} - x^p$, $\gamma' = g(x^{p+1}) - g(x^p)$, $p < j$.

resulta:

$$H_{j+1}\gamma' = H_j\gamma' + \frac{(\delta - H_j\gamma)^T (\delta - H_j\gamma)^T \gamma'}{(\delta - H_j\gamma)^T \gamma'}$$

Porém, se f é quadrática e supomos, por indução, que $H_j\gamma' = \delta'$ é;

$$(\delta - H_j\gamma)^T \gamma' = \delta^T \gamma' - \gamma'^T H_j \gamma' = \delta \gamma' - \gamma'^T \delta' = \delta^T G \delta' - \delta'^T G \delta' = 0$$

Logo, a propriedade $H^{j+1}\gamma' = \delta'$ se conserva. Ao término de n iterações, $H^n\gamma' = \delta'$, donde δ' e γ' assumem quaisquer dos valores $x^{k+1} - x^k$ ou $g(x^{k+1}) - g(x^k)$, respectivamente. Portanto, se aqueles vetores eram independentes, $H_n = G^{-1}$.

Apesar desta interessante propriedade, a correção de posto 1 não se usa devido a:

- 1) O denominador da fórmula de correção pode ser zero.
- 2) H_k pode não ser positiva definida.
- 3) H_k pode ser singular.
- 4) H_k pode tender ao infinito (causar overflow).

Mostraremos agora, uma consideração sugerida por Fletcher (1970) como elemento de decisão entre a fórmula BFGS e DFP.

Para a fórmula de correção de posto 1 $\theta = \frac{\delta^T \gamma}{\delta^T \gamma - \gamma^T H \gamma}$

na Família de Fletcher. Como se pede que $\delta^T \gamma > 0$, então:

$$\delta^T \gamma > \gamma^T H \gamma \Rightarrow \delta^T \gamma - \gamma^T H \gamma > 0 \Rightarrow \theta > 1$$

ou $\delta^T \gamma < \gamma^T H \gamma \Rightarrow \delta^T \gamma - \gamma^T H \gamma < 0 \Rightarrow \theta < 0$

Assim, a fórmula de correção de posto 1 não está na

Família Restrita de Fletcher.

Considerando que $H_k^\theta = \theta H_k^1 + (1-\theta)H_k^0$, se $\theta = 0$ temos $H_k^\theta = H_k^0$, isto é a DFP e se $\theta = 1$, $H_k^\theta = H_k^1$, ou seja, a BFGS.

Se $\theta > 1$ então a fórmula de correção de posto 1 está "mais perto" da BFGS, logo, devemos usar a BFGS e se $\theta < 0$ ela está "mais perto" da DFP, logo devemos usar a DFP.

Entretanto, pode ser dada uma outra interpretação para esta decisão:

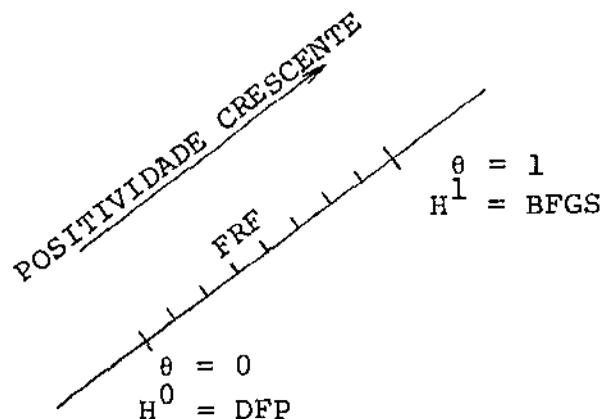
$$\frac{\delta^T \gamma}{\delta^T \gamma - \gamma^T H \gamma} \begin{cases} < 0 & \Leftrightarrow \gamma^T H \gamma > \delta^T \gamma \\ > 1 & \Leftrightarrow \gamma^T H \gamma < \delta^T \gamma \end{cases}$$

Se nestas desigualdades escrevemos $\delta \cong G^{-1} \gamma$ temos:

$$\gamma^T H \gamma > \gamma^T G^{-1} \gamma \quad (2.4.1)$$

ou
$$\gamma^T H \gamma < \gamma^T G^{-1} \gamma \quad (2.4.2)$$

Em (2.4.1) H é maior que G^{-1} , logo devemos diminuir escolhendo a "atualização menor" que é a DFP e em (2.4.2) H é menor que G^{-1} , logo convém aumentá-la escolhendo a "atualização maior" que é a BFGS.



Devemos observar que estamos utilizando sempre a interpretação $H_K^\theta = \theta H_K^1 + (1-\theta)H_K^0$ da Família de Fletcher. De acordo com ela, a família é uma reta no espaço das matrizes simétricas e quanto mais à direita desta, as matrizes são "maiores", mais definidas positivas ou menos singulares.

CAPÍTULO III

A BUSCA UNIDIMENSIONAL

3.1) RELAXAÇÃO:

A condição $\delta^T \gamma > 0$ pedida no teorema 2.3.1 do capítulo anterior, implica assumirmos algum tipo de relaxação, isto é, supor que estamos iterando segundo

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k H_k g(x^k) \quad (3.1.1)$$

ou
$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k B_k^{-1} g(x^k) \quad (3.1.2)$$

que são as fórmulas de iteração dos métodos quase-Newton.

Agora, vamos mostrar que $\delta^T \gamma > 0$ impõe uma condição bastante importante sobre o parâmetro λ_k .

Dizer que $\delta^T \gamma > 0$ é o mesmo que

$$\delta^T [g(x^{k+1}) - g(x^k)] > 0$$

$$\delta^T g(x^{k+1}) - \delta^T g(x^k) > 0$$

ou
$$\delta^T g(x^{k+1}) > \delta^T g(x^k)$$

Definindo

$$\varphi(\lambda) = f(x^k - \lambda H_k g_k)$$

onde $g_k = g(x^k)$, temos:

$$\delta^T g(x^{k+1}) = \langle \delta, g(x^k - \lambda_k H_k g_k) \rangle = \varphi'(\lambda_k)$$

Analogamente,

$$\varphi'(0) = \delta^T g(x^k)$$

Portanto, $\delta^T \gamma > 0$ equivale a $\varphi'(\lambda_k) > \varphi'(0)$.

A outra condição que, claramente deve ser pedida e que também requer relaxação, é $f(x^{k+1}) < f(x^k)$. O fato de que $H_k(B_k)$ é positiva definida garante que isto aconteça quando tomamos λ_k suficientemente pequeno.

A última condição é a mais importante, pois não deve deixar de ser cumprida, enquanto que a primeira ($\delta^T \gamma > 0$), pode não se verificar em funções não convexas para nenhum λ_k .

Outra questão que devemos elucidar é se os métodos de relaxação - que determinam λ_k - devem ou não usar derivadas.

Se levarmos em consideração que ao avaliarmos uma função de uma variável em dois pontos, teremos a mesma informação que avaliar a função e a derivada em um ponto, poderíamos argumentar que devemos usar derivadas se as avaliações de f e ∇f em um ponto fossem menos custosas que as de f , mas isto depende da função.

Entretanto, existem dois argumentos favoráveis ao uso de derivadas que são:

- 1) Em x^k , já se conhece o gradiente e não será necessário recalculá-lo.
- 2) $\delta^T \gamma \geq 0$ exige o uso de gradientes.

Apresentaremos a seguir, alguns critérios de relaxação usados nos métodos quase-Newton [6, 14].

3.2) MINIMIZAÇÃO UNIDIMENSIONAL:

Atualmente, o critério de relaxação mais utilizado é o de minimização unidimensional. Ele foi utilizado por Fletcher

e Powell em 1962, usando para isto, um método de interpolação cúbica (com derivadas) que descreveremos no final do capítulo.

Como vimos, λ_k deve satisfazer a $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ porém, este requerimento pode ser satisfeito por um λ_k , arbitrariamente pequeno e, então, $\{x_k\}$ poderá convergir para um ponto onde o ∇f não é zero. Por isso, o mais razoável é fazer

$$f[x^k - \lambda_k H_k g(x_k)] \leq f(x^k) - \alpha \lambda_k \langle g(x^k), H_k g(x^k) \rangle \quad (3.2.1)$$

com α , geralmente, sendo escolhido no intervalo $[10^{-4}, 10^{-1}]$.

Fletcher (1970) usou o critério de tipo (3.2.1) com $\alpha = 10^{-4}$, provando primeiro com $\lambda = 1$ e depois dividindo por 10 até satisfazer o critério.

De uma maneira geral, os λ_k excessivamente pequenos são excluídos por procedimento de busca numérica, mas, teoricamente, necessitamos impor que

$$\langle g(x^{k+1}), \delta_k \rangle \geq \beta \langle g(x^k), \delta_k \rangle \quad \text{com } \beta \in (\alpha, 1) \quad (3.2.2)$$

Usualmente, tomamos $\beta = 0.7$ porém, outros valores poderão ser usados dentro do intervalo $[10^{-4}, 0.99]$, dependendo da função que está sendo usada, visando uma melhor eficiência do algoritmo.

A primeira condição (3.2.1) é chamada descida suficiente e a outra (3.2.2) é "de tipo Atman".

Em termos da função de uma variável

$$\varphi(\lambda) = f[x^k - \lambda H_k g(x^k)]$$

$\lambda \geq 0$, $\varphi'(0) < 0$, as condições (3.2.1) e (3.2.2) passarão a ser:

$$1) \quad \varphi(\lambda_k) < \varphi(0) + \lambda_k \alpha \varphi'(0)$$

$$2) \quad \varphi'(\lambda_k) \geq \beta \varphi'(0) \quad 0 < \alpha < \beta < 1$$

A seguir, vejamos para que condições de φ , existe um λ_k que satisfaz 1 e 2.

De 1, temos que

$$\frac{\varphi(\lambda_k) - \varphi(0)}{\lambda_k} = \alpha \varphi'(0)$$

Como

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\varphi(\lambda) - \varphi(0)}{\lambda} = \varphi'(0)$$

deduzimos que esta condição se cumpre em todo um intervalo $0 < \lambda < b$ (b às vezes infinito) que chamaremos de I_0 .

TEOREMA 3.2.1: Se φ é contínua e I_0 está limitado ($b < \infty$), então existe algum λ que cumpre:

$$(1) \quad \varphi(\lambda_k) < \varphi(0) + \lambda_k \alpha \varphi'(0)$$

$$(2) \quad \varphi'(\lambda_k) \geq \beta \varphi'(0) \quad 0 < \alpha < \beta < 1$$

PROVA: Seja $b = \text{supremo de } I_0 < \infty$. Pela continuidade de φ ,

$$\frac{\varphi(b) - \varphi(0)}{b} = \alpha \varphi'(0)$$

e pelo teorema do valor médio, existe λ , $0 \leq \lambda \leq b$ tal que,

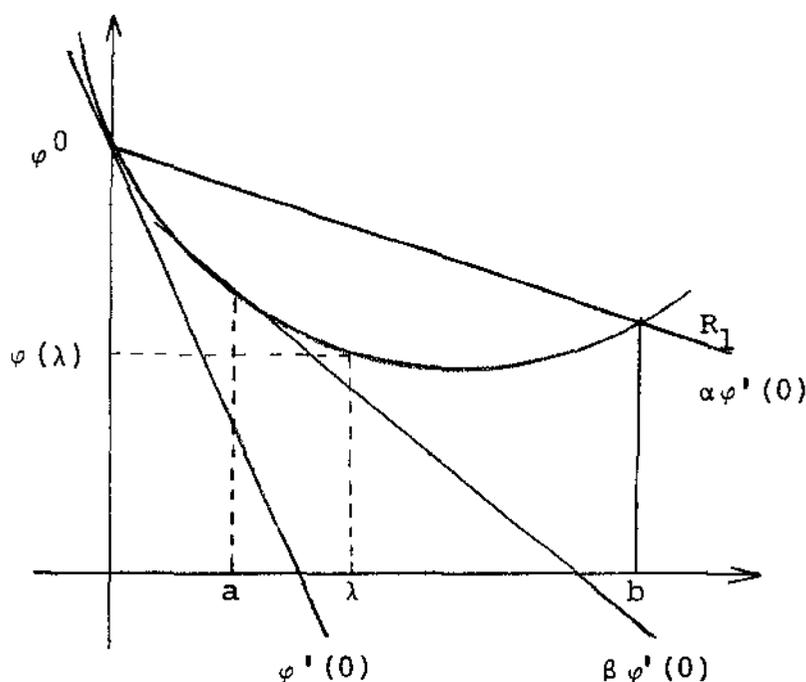
$$\frac{\varphi(b) - \varphi(0)}{b} = \varphi'(\lambda)$$

Logo,

$$\varphi'(\lambda) = \alpha \varphi'(0) > \beta \varphi'(0)$$

pois $\alpha < \beta$ e $\varphi'(0) < 0$. Portanto, λ satisfaz a condição 1, mas como $\lambda \in I_0$, logo satisfaz 2.

Atualmente, existe um outro critério de relaxação que combina a condição (3.2.1) com a (3.2.2).



(Diagrama 3)

[a →) - intervalo dos pontos que satisfazem (1).

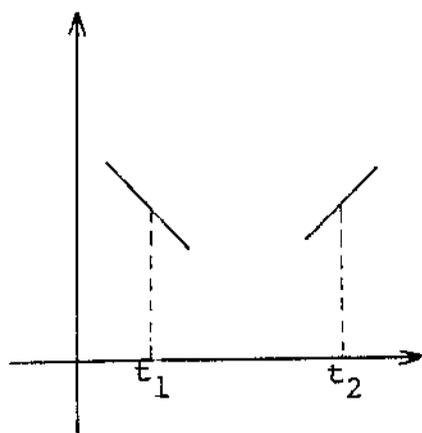
(a,b) - intervalo dos pontos que satisfazem (2).

$(\lambda, \varphi(\lambda))$ - ponto ao que se refere o teorema 3.2.1 (a tangente - por ele é paralela a R_1) e que é determinado por interpolação cúbica, onde $\varphi(\lambda) = f(x^k - \lambda H_k g_k)$.

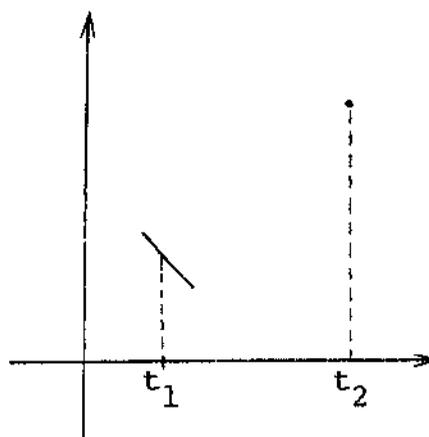
3.3) O MÉTODO DE INTERPOLAÇÃO CÚBICA:

Seja $\varphi : [t_1, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ uma função derivável, tal que

$\varphi'(t_1) < 0$. Suponhamos que exista um ponto $t_2 \in [a, \infty)$ tal que, ou $\varphi'(t_2) \geq 0$ (fig. 1) ou $\varphi(t_2) > \varphi(t_1)$ (fig. 2).



(Fig. 1)



(Fig. 2)

Então, existe $t \in (t_1, t_2]$ que é um mínimo local de φ . Além disso, existe um polinômio cúbico

$$P(t) = p_0 + p_1 t + p_2 t^2 + p_3 t^3$$

que passa por $(t_1, \varphi(t_1))$ e por $(t_2, \varphi(t_2))$, tal que:

$$P'(t_1) = \varphi'(t_1) \quad \text{e} \quad P'(t_2) = \varphi'(t_2)$$

e que tem seu mínimo local em $(t_1, t_2]$.

O mínimo desse polinômio será uma boa aproximação a um mínimo local da função φ .

As fórmulas para calcularmos o mínimo de $P(t)$ são dadas por:

$$\mu_1 = \frac{\varphi'(t_1) + \varphi'(t_2)}{3} - \frac{\varphi(t_1) - \varphi(t_2)}{t_1 - t_2}$$

$$\mu_2 = \left[\mu_1^2 - \varphi'(t_1)\varphi'(t_2) \right]^{1/2}$$

$$t = t_2 - (t_2 - t_1) \left[\frac{\varphi'(t_2) + \mu_2 - \mu_1}{\varphi'(t_2) - \varphi'(t_1) + 2\mu_2} \right]$$

Após calcularmos o novo ponto t , pelas fórmulas acima explicitadas, determinamos $\varphi(t)$ e $\varphi'(t)$ e t será o mínimo local de φ se $|\varphi'(t)| < \epsilon$, onde ϵ é um valor pequeno pré-estabelecido. Se isto não acontecer, testamos as condições dadas nas figuras 1 e 2, para escolhermos um novo intervalo (menor que o anterior), a fim de determinarmos o mínimo local de φ , isto é, caso ocorra $\varphi''(t) \geq 0$ escolheremos o intervalo $(t_1, t]$, no entanto, se $\varphi(t_2) > \varphi(t)$ o intervalo escolhido será $(t, t_2]$. O processo continua até que o mínimo local seja encontrado.

CAPÍTULO IV

UM MÉTODO PARA MODIFICAR A FATORIZAÇÃO DE CHOLESKY

No Capítulo II, vimos que se as matrizes H_k são geradas pelo método DFP, os λ_k são determinados por minimização unidimensional e H_0 é positiva definida, então, todas as matrizes H_k também serão. Entretanto, se estas forem computadas numa máquina de precisão finita e nenhuma medida de prevenção for adotada, as H_k poderão tornar-se indefinidas ou mesmo singular, devido aos erros de arredondamento, levando o algoritmo a fracassar ou terminar prematuramente.

Para evitar isso, uma possibilidade é recomeçar com H_k substituída por uma matriz positiva definida e fixa, a cada certo número de iterações ou de acordo com algum critério pré-estabelecido. Assim procedendo, a velocidade de convergência dos algoritmos diminui e a solução seria trabalhar, não com a mesma matriz, mas com a sua fatorização de Cholesky.

É bom lembrar que as referências feitas acima sobre as matrizes H_k , valem também para todas as matrizes dos métodos quase-Newton, ou seja, tudo aquilo que explicamos sobre as fórmulas de "tipo H", ocorre também para as fórmulas de "tipo B".

4.1) A FATORIZAÇÃO DE CHOLESKY:

Seja A uma matriz $n \times n$, simétrica e positiva definida. Então, A tem uma fatorização triangular na forma

$$A = L D L^T \quad (4.1.1)$$

onde L é uma matriz triangular inferior, com os elementos da dia

gonal principal iguais a um e D é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal são positivos.

Os elementos de L e D , que são únicos, podem ser determinados ou por colunas ou por linhas, igualando os elementos correspondentes na equação (4.1.1).

Sejam $l_{i,j}$ e $a_{i,j}$ os elementos da i -ésima linha e j -ésima coluna de L e A respectivamente, e d_j o j -ésimo elemento diagonal de D . Podemos então, escrever o seguinte algoritmo para a fatorização de (4.1.1):

1) Faça $d_1 = a_{11}$

2) Para $i = 2, \dots, n$, faça

$$l_{j,i} = \frac{a_{j,i} - \sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{i,k} l_{j,k}}{d_i}, \quad j = k+1, \dots, n$$

$$d_i = a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{i,k}^2 \quad (4.2.2)$$

EXEMPLO: Seja

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 3 & 2 \\ 1 & 3 & 4 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

Pelo algoritmo temos, $d_1 = 1$

para $i = 2$: $l_{1,2} = 1$ e $d_2 = 4$

para $i = 3$: $l_{1,3} = 1$, $l_{2,3} = \frac{1}{2}$ e $d_3 = 2$.

para $i = 4$: $l_{1,4} = 1$, $l_{2,4} = \frac{1}{4}$, $l_{3,4} = \frac{3}{4}$ e $d_4 = -\frac{3}{8}$.

A equação (4.2.2) estabelece cotas, a priori, dos elementos de $LD^{1/2}$ que, portanto, não podem crescer demasiadamente, a não ser que A tenha elementos diagonais muito grandes. Disto, resulta a estabilidade numérica da fatorização.

Existem subrotinas que implementam a fatorização de Cholesky, possuindo um controle que prevê quando a matriz for positiva definida, podendo modificá-la ou mesmo avisar em qualquer caso de acidente.

Para os métodos quase-Newton, melhor que calcular a fatorização é fazer a sua modificação quando a matriz se faz uma correção.

4.2) A MODIFICAÇÃO DA FATORIZAÇÃO:

Consideremos o caso em que uma matriz $n \times n$, simétrica e positiva definida A , é modificada por uma matriz simétrica de posto um, isto é,

$$\bar{A} = A + \alpha z z^T$$

onde, α é um escalar e $z \in \mathbb{R}^n$.

Vamos admitir que conhecemos a fatorização de Cholesky de A , ou seja, $A = LDL^T$. Para determinarmos os fatores \bar{L} e \bar{D} tais que, $\bar{A} = \bar{L}\bar{D}\bar{L}^T$, faz-se necessário admitir que A e \bar{A} sejam positivas definidas, pois de outra maneira, os algoritmos que determinam os fatores modificados são numericamente instáveis, até mesmo se a fatorização de \bar{A} existe.

Considerando que

$$\begin{aligned}
 \bar{A} &= A + \alpha z z^T \\
 &= LDL^T + \alpha (Lp) (Lp)^T \\
 &= L(D + \alpha p p^T) L^T
 \end{aligned}
 \tag{4.2.1}$$

onde, $Lp = z$, tudo o que necessitamos fazer é calcular a fatorização de $D + \alpha p p^T$ tal que,

$$D + \alpha p p^T = \tilde{L} \tilde{D} \tilde{L}^T \tag{4.2.2}$$

depois da qual será $\tilde{D} = \tilde{D}$ e $\tilde{L} = L\tilde{L}$, porque o produto de duas matrizes triangulares inferiores é uma matriz triangular inferior.

Existem vários métodos que se distinguem pela forma de fatorizar (4.2.2), cada um com seu mérito, mas todos baseados na igualdade fundamental (4.2.1).

Neste nosso trabalho, usaremos a modificação feita através do uso das matrizes de Householder, o que para tanto, descreveremos abaixo alguns comentários sobre as mesmas.

Para reduzir um vetor dado z , para um múltiplo da primeira coluna da matriz identidade, necessitamos encontrar uma matriz ortogonal P tal que,

$$Pz = -\gamma e_1 \tag{4.2.3}$$

Isto pode ser feito usando uma matriz de transformação de Householder $P = I + \frac{1}{\tau} uu^T$ [9], onde

$$\begin{aligned}
 u &= z + \gamma e_1 \\
 \tau &= -\gamma u_1
 \end{aligned}
 \tag{4.2.4}$$

e $\gamma = \sin(z_1) \|z\|_2$

Uma matriz triangular superior especial $R(p, \rho, \gamma)$ tem

a forma

$$R(p, \rho, \gamma) = \begin{bmatrix} \gamma_1 & \rho_1 p_2 & \rho_1 p_3 & \dots & \rho_1 p_n \\ 0 & \gamma_2 & \rho_2 p_3 & \dots & \rho_2 p_n \\ 0 & 0 & \gamma_3 & \dots & \rho_3 p_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \gamma_{n-1} & \rho_{n-1} p_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_n \end{bmatrix}$$

LEMA 1: Sejam $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$, $\eta = \text{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}, 1)$ e $e = (1, 1, \dots, 1, 1)^T$.

$$(1) \quad R(p, \rho, \gamma)D = DR(\bar{p}, \bar{\rho}, \bar{\gamma})$$

$$\text{onde } \bar{\rho}_i = \frac{\rho_i}{d_i}, \quad \bar{p}_i = d_i p_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$(2) \quad R(p, \rho, \gamma) = \eta R(\bar{p}, \rho, e)$$

$$\text{onde } \bar{p}_i = \frac{p_i}{\gamma_i} \quad (i < n), \quad \bar{p}_n = p_n$$

$$\text{e } \bar{\rho}_i = \frac{\rho_i}{\gamma_i} \quad (i > 1), \quad \bar{\rho}_1 = \rho_1$$

LEMA 2: Seja R uma matriz triangular superior e $R(p, \rho, \gamma)$ uma matriz triangular superior especial. O produto $\bar{R} = R(p, \rho, \gamma)R$ pode ser determinado usando a seguinte relação de recorrência:

$$(1) \quad \text{Seja } w^{(1)} = R^T p$$

(2) Para $i = 1, 2, \dots, n$ sejam

$$\bar{r}_{ii} = \gamma_i r_{ii} \quad j = i+1, i+2, \dots, n$$

$$w_j^{(i+1)} = w_j^{(i)} - p_i r_{ij} \quad j = i+1, i+2, \dots, n$$

$$\bar{r}_{ij} = \gamma_i r_{ij} + \rho_i w_j^{(i+1)} \quad j = i+1, i+2, \dots, n$$

4.3) A MODIFICAÇÃO DA FATORIZAÇÃO USANDO AS MATRIZES DE HOUSEHOLDER:

Para efetuar a fatorização (4.2.2) usaremos as matrizes de Householder, o que para tanto, faz-se necessário escrever

$$\bar{A} = L D^{1/2} (I + \alpha v v^T) D^{1/2} L^T \quad (4.3.1)$$

onde v é a solução da equação $LD^{1/2}v = z$.

Podemos fatorizar $I + \alpha v v^T = (I + \sigma v v^T)(I + \sigma v v^T)$ tomando

$$\sigma = \frac{\alpha}{1 + (1 + \alpha v^T v)^{1/2}}$$

onde $(1 + \alpha v^T v)$ é um múltiplo positivo do determinante de \bar{A} e se esta for positiva definida, σ será real.

Queremos determinar a matriz

$$\hat{L} = (I + \sigma v v^T) P_1 P_2 \dots P_{n-1}$$

onde P_1, P_2, \dots, P_{n-1} são matrizes de transformação de Householder. Como ilustração, consideraremos somente a aplicação da primeira matriz P_1 .

Tomemos $P_1 = I + \frac{1}{\tau} u u^T$ e v na forma $v = [v_1 \ w^T]$ onde w é um vetor com $n-1$ componentes. Como

$$I + \sigma v v^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} + \sigma \begin{bmatrix} v_1 \\ w \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & w^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \sigma v_1^2 & \sigma v_1 w^T \\ \sigma v_1 w & I + \sigma w w^T \end{bmatrix},$$

façamos $1 + \sigma v_1^2 = \theta$. Assim, P_1 transforma o vetor $[\theta \ \sigma v_1 \ w]$ em um múltiplo de e_1 e usando as relações (4.2.4), definimos

$$\gamma^2 = \theta^2 + \sigma^2 v_1^2 w^T w$$

$$u_1 = \theta + \gamma \quad \text{onde } \gamma = +\sqrt{\gamma^2} \quad \text{pois } \theta > 0$$

$$\tau = -\gamma u_1$$

e u terá a seguinte forma $[u_1, \sigma v_1 w^T]$.

Consideremos agora que o resultado da aplicação da primeira transformação de Householder seja da forma

$$(I + \sigma v v^T) (I + \frac{1}{\tau} u u^T) = \begin{bmatrix} -\gamma & 0 \\ \delta w & I + \bar{\sigma} w w^T \end{bmatrix} \quad (4.3.2)$$

onde δ e $\bar{\sigma}$ são valores determinados a seguir.

Sabemos que

$$(I + \sigma v v^T) (I + \frac{1}{\tau} u u^T) = \begin{bmatrix} 1 + \sigma v_1^2 & \sigma v_1 w^T \\ \sigma v_1 w & I + \sigma v v^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{\tau} u_1^2 & \frac{1}{\tau} u_1 \sigma v_1 w^T \\ \frac{1}{\tau} u_1 \sigma v_1 w & I + \frac{1}{\tau} \sigma^2 v_1^2 w w^T \end{bmatrix} \quad (4.3.3)$$

De (4.3.2) e (4.3.3) temos que:

$$1) \quad \delta w = (1 + \frac{1}{\tau} u_1^2) \sigma v_1 w + \frac{1}{\tau} u_1 \sigma v_1 w (1 + \sigma w w^T)$$

onde, através de simplificações,

$$\delta = -\sigma \frac{v_1}{\gamma} (2 + \sigma v^T v)$$

$$2) \quad I + \bar{\sigma} w w^T = \frac{1}{\tau} u_1 \sigma^2 v_1^2 w w^T + I + \sigma w w^T + \frac{1}{\tau} \sigma^2 v_1^2 w w^T + \frac{1}{\tau} \sigma^3 v_1^2 w w^T w w^T$$

dando

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\tau} u_1 \sigma^2 v_1^2 + \sigma + \frac{1}{\tau} \sigma^2 v_1^2 + \frac{1}{\tau} \sigma^3 v_1^2 w^T w$$

Para continuarmos o processo, devemos aplicar a segunda matriz de transformação de Householder P_2 , da mesma maneira - que P_1 , e isso é possível, pois a sub-matriz $(n-1) \times (n-1)$ $I + \bar{\sigma} w w^T$ tem a mesma estrutura que $I + \sigma v v^T$ e ainda,

$$1 + \bar{\sigma} w^T w = \frac{1}{\gamma} (I + \sigma v^T v)$$

o que garante que o sinal escolhido na definição (4.2.4) permaneça o mesmo.

Procedendo da mesma maneira, na aplicação de todas as transformações até chegarmos a P_{n-1} , teremos:

$$(I + \sigma v v^T) P_1 P_2 \dots P_{n-1} = R(v, \delta, -\gamma)^T$$

Agora, a fórmula (4.3.1) será:

$$\bar{A} = L D^{1/2} R(v, \delta, -\gamma)^T R(v, \delta, -\gamma) D^{1/2} L^T \quad (4.3.4)$$

Mas, pelo Lema 1 da seção anterior temos:

$$\begin{aligned} R(v, \delta, -\gamma) D^{1/2} &= R(D^{1/2} v, \delta, -D^{1/2} \gamma) \\ &= D^{1/2} R(p, D^{1/2} \delta, -\gamma) \\ &= D^{1/2} {}_n R(p, \beta, e) \end{aligned}$$

onde $n = \text{diag} (\gamma_j)$

$$\left. \begin{aligned} p_j &= d_j^{1/2} v_j \\ \beta_j &= \frac{-\delta_j}{d_j^{1/2} \gamma_j} \end{aligned} \right\} \quad j = 1, \dots, n$$

Substituindo este resultado em (4.3.4) temos:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= L R(p, \beta, e)^T {}_n D^{1/2} D^{1/2} {}_n R(p, \beta, e) L^T \\ &= L R(p, \beta, e)^T {}_n D {}_n R(p, \beta, e) L^T \end{aligned}$$

Tomando $R(p, \beta, e)^T = L(p, \beta, e)$ vem

$$\bar{A} = L L(p, \beta, e) {}_n D {}_n L(p, \beta, e)^T L^T$$

e, portanto,

$$\bar{L} = LL(p, \beta, e)$$

$$e \quad \bar{D} = \eta D \eta$$

Agora, de $\bar{D} = \eta D \eta$, temos que: $\bar{d}_j = \gamma_j^2 d_j$ e como γ_j^2 é a soma de quadrados, esta expressão garante que o d_j computado pode nunca ser negativo.

Para computar \bar{L} de L e $L(p, \beta, e)$, usamos o lema 2 da seção anterior. Podemos então, sumarizar o algoritmo:

1) Resolva $L_p = z$

2) Defina $w_j^{(1)} = z_j$

$$s_j = \sum_{i=j}^n \frac{p_i^2}{\bar{d}_i} = \sum_{i=j}^n q_i \quad \left. \vphantom{s_j} \right\} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$\alpha_1 = \alpha$$

$$\sigma_1 = \frac{\alpha}{1 + \sqrt{1 + \alpha s_1}}$$

3) Para $j = 1, 2, \dots, n$ compute

a) $q_j = \frac{p_j^2}{\bar{d}_j}$

b) $\theta_j = 1 + \sigma_j q_j$

c) $s_{j+1} = s_j - q_j$

d) $\gamma_j^2 = \theta_j^2 + \sigma_j^2 q_j s_{j+1}$

e) $\bar{d}_j = \gamma_j^2 d_j$

f) $\beta_j = \alpha_j p_j / \bar{d}_j$

g) $\alpha_{j+1} = \alpha_j / \gamma_j^2$

$$h) \sigma_{j+1} = \sigma_j (1 + \gamma_j) / [\gamma_j (\theta_j + \gamma_j)]$$

$$i) \left. \begin{aligned} w_r^{(j+1)} &= w_r^{(j)} - p_j \ell_{rj} \\ \bar{\ell}_{rj} &= \ell_{rj} + \beta_j w_r^{(j+1)} \end{aligned} \right\} r = j+1, j+2, \dots, n$$

Este método requer $\frac{3}{2} n^2 + O(n)$ multiplicações e $n+1$ raízes quadradas.

EXEMPLO: Sejam

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix}, \quad z = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad e \quad \alpha = 2.$$

Então,

$$\bar{A} = A + \alpha z z^T = \begin{bmatrix} 5 & 4 & 3 \\ 4 & 7 & 3 \\ 3 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

Aplicando a fatorização de Cholesky vista no parágrafo 4.1 para A e \bar{A} , temos:

$$1) \quad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{11} & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad D = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{11}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{120}{33} \end{bmatrix}$$

$$2) \quad \bar{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.8 & 1 & 0 \\ 0.6 & 0.157894 & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad \bar{D} = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3.8 & 0 \\ 0 & 0 & 4.105263 \end{bmatrix} \quad (4.3.5)$$

Usando agora, a modificação da fatorização dada no parágrafo 4.3, temos:

(1) Resolvendo a equação $L_p = z$, vem $p_1=1$, $p_2=\frac{1}{3}$ e $p_3=\frac{21}{33}$.

(2) Definimos $w_j^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ e determinamos $s_1 = \frac{2001}{4290}$ e

$$\sigma_1 = 0.836721 \quad \text{e tomamos } \alpha_1 = 2.$$

(3) Para $j = 1$

$$(a) \quad q_1 = \frac{1}{3} = 0.333333 \quad (b) \quad \theta_1 = 1.278907$$

$$(c) \quad s_2 = 0.13311 \quad (d) \quad \gamma_1^2 = 1.666664 \quad \text{e} \quad \gamma_1 = 1.290993$$

$$(e) \quad \bar{d}_1 = 4.999992 \quad (f) \quad \beta_1 = 0.4$$

$$(g) \quad \alpha_2 = 1.2 \quad (h) \quad \sigma_2 = 0.577782$$

$$(i) \quad w_2^{(2)} = \frac{1}{3}, \quad w_3^{(2)} = \frac{2}{3}, \quad \bar{l}_{2,1} = 0.8 \quad \text{e} \quad \bar{l}_{3,1} = 0.6.$$

Para $j = 2$

$$(a) \quad q_2 = \frac{1}{33} \quad (b) \quad \theta_2 = 1.01750$$

$$(c) \quad s_3 = 0.102797 \quad (d) \quad \gamma_2^2 = 1.036346 \quad \text{e} \quad \gamma_2 = 1.018001$$

$$(e) \quad \bar{d}_2 = 3.799936 \quad (f) \quad \beta_2 = 0.105264$$

$$(g) \quad \alpha_3 = 1.181958 \quad (h) \quad \sigma_3 = 0.562685$$

$$(i) \quad w_3^{(3)} = 0.636363 \quad \text{e} \quad \bar{l}_{3,2} = 0.157895$$

Para $j = 3$

$$(a) \quad q_3 = 0.102797 \quad (b) \quad \theta_3 = 1.057842$$

$$(c) \quad s_4 = 0. \quad (d) \quad \gamma_3^2 = 1.119030$$

$$(e) \quad \bar{d}_3 = 4.069198$$

Podemos então, formar as matrizes,

$$\bar{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.8 & 1 & 0 \\ 0.6 & 0.157895 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{D} = \begin{bmatrix} 4.999992 & 0 & 0 \\ 0 & 3.799936 & 0 \\ & & 4.069198 \end{bmatrix}$$

que correspondem a uma boa aproximação dos resultados encontrados em (4.3.5), quando aplicamos a fatorização de Cholesky.

Vemos aqui que, com o uso de fatorizações, os métodos de "tipo B" não são mais custosos que os de "tipo H", como se pensava, porque se B_k está fatorizada, calcular $B_k^{-1}g$ é tão custoso como calcular $H_k g$.

Por isso, a tendência atual é usar métodos de "tipo B". Uma razão para preferi-los é que se dispomos de alguma informação do hessiano, ela pode ser incorporada nas matrizes B_k , mas não nas H_k . Exemplificando, temos: Se o hessiano é "esparso" sua inversa não é.

CAPÍTULO V
RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA

5.1) A CONVERGÊNCIA SUPERLINEAR:

Um algoritmo para ser razoável deveria, pelo menos, ter convergência linear, no sentido de que se $\{x_k\}$ converge para x^* então, existe $\alpha \in (0,1)$ e $k_0 \geq 0$, tal que,

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \alpha \|x_k - x^*\|, \quad k \geq k_0$$

Isto garante que, eventualmente, o erro venha a ser decrescido pelo fator $\alpha > 1$. Agora, para ser competitivo, deveria ter convergência linear, isto é,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 0$$

Os principais resultados de convergência superlinear foram obtidos por Broyden, Dennis e Moré [3, 5]. O primeiro teorema dessa sequência refere-se à convergência geral de métodos do tipo quase-Newton.

Consideremos o problema de resolver $g(x) = 0$, onde $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $g \in C^1(\mathbb{R}^n)$, $g(x^*) = 0$, $g'(x^*)$ não singular. Suponhamos que $\exists M > 0$ tal que, para todo x numa certa vizinhança V de x^* ,

$$\|g'(x) - g'(x^*)\| \leq M \|x - x^*\|$$

Para todo $x \in V$, $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ não singular, define-se o par (\bar{x}, \bar{B}) . Define-se, também, um método iterativo por $x^0 \in V$, $B_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x^{k+1} = \bar{x}$ ($\bar{x} = x - B^{-1}g(x)$), $B_{k+1} = \bar{B}$. Então, vale o seguinte teorema:

TEOREMA 5.1.1 (de convergência linear de Broyden, Dennis e Moré):
Seja $r \in (0,1)$. Suponhamos que para todo $x \in V$, $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, va
le que:

$$\begin{aligned} \|\bar{B}_0 - g'(x^*)\| &\leq (1+K_1 \max\{\|\bar{x}-x^*\|, \|x-x^*\|\}) \\ &\quad \|B - g'(x^*)\| + K_2 \max\{\|\bar{x}-x^*\|, \|x-x^*\|\} \end{aligned}$$

Então, existem $\epsilon, \delta > 0$ tais que, se $\|x^0 - x^*\| \leq \delta$ e

$$\|B_0 - g'(x^*)\| \leq \epsilon$$

a iteração definida por

$$x^{k+1} = x^k - B_k^{-1} g(x^*)$$

está bem definida, $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$ e para todo $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq r \|x^k - x^*\|$$

Este teorema garante a convergência local e linear de uma grande variedade de métodos como: Newton com refinamento, Newton discreto, Levenberg-Marquardt, etc. (ver [5]), e em particular de métodos do tipo quase-Newton.

Para se obter convergência superlinear, precisa-se de uma análise mais elaborada. Dennis e Moré [5] provaram a seguinte condição necessária e suficiente para que um método, com as hipóteses do Teorema 5.1.1, tenha convergência superlinear.

TEOREMA 5.1.2: Suponhamos as hipóteses do Teorema 5.1.1. Então, a sequência $\{x^k\}$ converge superlinearmente se, e somente se,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|B_k - g'(x^*)\| \|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^{k+1} - x^k\|^2} = 0 \quad (5.1.1)$$

Dennis e Moré mostram em [5] que alguns métodos parti-

culares cumprem a equação (5.1.1). Entre eles, se encontram métodos quase-Newton para minimização unidimensional. Concretamente, eles obtiveram os seguintes teoremas:

COROLÁRIO 5.1.3: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$; $g'(x^*)$ não-singular e tal que g' é contínua em x^* . Seja $\{B_k\}$ uma sequência de matrizes não-singulares e suponhamos que para algum x^0 numa vizinhança de V de x^* , a sequência $\{x^k\}$, gerada por

$$\bar{x} = x - \lambda_k B_k^{-1} g(x)$$

está em V e converge para x^* . Se a equação (5.1.1) verifica-se, então, $\{x^k\}$ converge superlinearmente para x^* , onde $g(x^*) = 0$ se, e somente se, $\{\lambda_k\}$ converge para a unidade.

TEOREMA 5.1.4: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, convexa numa vizinhança V de x^* , onde $g'(x^*)$ é simétrica e positiva definida, e suponhamos que $\exists M > 0$ tal que, para todo $x \in V$,

$$\|g'(x) - g'(x^*)\| \leq M \|x - x^*\|^p$$

para algum $p > 0$. Seja $\{x^k\}$ uma sequência em V que satisfaz a

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|x^k - x^*\|^p < +\infty$$

Então, existe um inteiro positivo k_0 , tal que, para qualquer matriz simétrica $B_{k_0} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ as sequências $\{\delta_k\}$, $\{\gamma_k\}$ e $\{B_k\}$ do método DFP são bem definidas para $k \geq k_0$. Além disso,

$$(i) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \|g'(x^*)^{-1/2} B_k g'(x^*)^{-1/2} - I\|_F \quad (*) \quad \text{existe e,}$$

(*) Definimos a norma de Frobenius para $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ por:

$$\|A\|_F^2 = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2.$$

$$(ii) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\| [B_k - g'(x^*)] \delta_k \|}{\| \delta_k \|} = 0$$

TEOREMA 5.1.5: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, duas vezes diferenciável em um conjunto convexo e aberto $V \in \mathbb{R}^n$, e admita que para algum $x^* \in V$, $g'(x^*)$ é não-singular e g' é contínua em x^* . Seja a sequência $\{x^k\}$ definida por

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k B_k^{-1} g(x^k)$$

onde a matriz não-singular B_k e o escalar λ_k são tais que

$$g(x^{k+1}) \delta_k = 0$$

e suponha que $\{x_k^k\}$ está em V e converge para x^* . Se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\| [B_k - g'(x^*)] \delta_k \|}{\| \delta_k \|} = 0$$

então $\{\lambda_k\}$ converge para a unidade, $g'(x^*) = 0$ e $\{x^k\}$ converge superlinearmente para x^* .

5.2) O CASO QUADRÁTICO:

Definição: Seja G uma matriz $n \times n$, simétrica e positiva definida ($G > 0$) e $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que d_1 e d_2 são G -conjugados se, e somente se, $d_1^T G d_2 = 0$.

TEOREMA 5.2.1: Se f é quadrática ($G > 0$), o método DFP (BFGS), com minimização unidimensional, gera direções G -conjugadas. Além disso, $H_k = G^{-1}$ ($B_k = G^{-1}$) com $k \leq n$ e $x^{k+1} = x^*$.

PROVA: Sabemos que: $\delta_k = x^{k+1} - x^k$
 $\gamma_k = g(x^{k+1}) - g(x^k)$

Se δ_i é conjugado a δ_j ($i \neq j$), por definição é $\delta_i^T G \delta_j = 0$, isto é, $\delta_i^T \gamma_j = 0$ ou $\gamma_i^T \delta_j = 0$.

Suponhamos, por indução, que $\delta_k^T \gamma_j = 0$ e $H_k \gamma_j = \delta_j$, $\forall j < k$, e provemos que elas se verificam para $k+1$.

Sabemos que $\delta_{k+1} = \lambda H_{k+1} g_{k+1}$, logo, se $\gamma < k$,

$$\delta_{k+1}^T = \lambda \left[g_{k+1}^T H_k \gamma_j + \frac{g_{k+1}^T \delta_k \delta_k^T \gamma_j}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{g_{k+1}^T H_k \gamma_k \gamma_k^T H_k \gamma_j}{\gamma_k^T H_k \gamma_k} \right]$$

Mas, por hipótese de indução, $\delta_k^T \gamma_j = 0$ e $H_k \gamma_j = \delta_j$, logo,

$$\begin{aligned} \delta_{k+1}^T \gamma_j &= \lambda [g_{k+1}^T \delta_j + 0 - 0] \\ &= \lambda \delta_j^T \gamma [g_{j+1} + (g_{j+2} - g_{j+1}) + \dots + (g_{k+1} - g_k)] = \\ &= \lambda \delta_j^T (g_{j+1} + \gamma_{j+1} + \dots + \gamma_k) \end{aligned}$$

Porém, $\delta_j^T g_{j+1} = 0$ pela minimização unidimensional e $\delta_j^T \gamma_{j+1} = 0$ por hipótese de indução. Logo $\delta_{k+1}^T \gamma_j = 0$ e

$$H_{k+1} \gamma_j = H_k \gamma_j + \frac{\delta_k \delta_k^T \gamma_j}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{H_k \gamma_k \gamma_k^T H_k \gamma_j}{\gamma_k^T H_k \gamma_k} = \delta_j$$

pois $\delta_k^T \gamma_j = 0$ e $H_k \gamma_j = \delta_j$.

Agora, falta provarmos que $\delta_{k+1}^T \gamma_k = 0$ e que $H_{k+1} \gamma_k = \delta_k$.

A segunda se verifica pelo fato de ser a EMF que é satisfeita pela DFP e,

$$\delta_{k+1}^T \gamma_k = \lambda g_{k+1}^T H_{k+1} \gamma_k = \lambda g_{k+1}^T \delta_k = 0$$

pela minimização na direção δ_k .

As direções $\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_{n-1}$ são linearmente independentes, pois são conjugadas e não nulas, a menos que um gradiente seja nulo. Logo, $\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_{n-1}$ são linearmente independentes. Então, $H_n = G^{-1}$ e $x^{n+1} = x^*$.

A mesma demonstração poderá ser obtida para o método BFGS. Portanto, os métodos BFGS e DFP têm terminação quadrática, isto é, minimizam quadráticas em um número finito de passos.

5.3) OUTROS RESULTADOS DE CONVERGÊNCIA:

O primeiro trabalho sobre a convergência dos métodos quase-Newton foi feito por Powell [14]. Para o caso em que a função é convexa, a busca linear é exata e o algoritmo DFP é aplicado, ele provou o seguinte teorema:

TEOREMA 5.3.1: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa tendo derivadas segundas contínuas em \mathbb{R}^n tais que, $\|G(x)\| \leq M$ para todo x . Suponhamos que o conjunto $\{x/f(x) \leq f(x^0)\}$ é compacto, então, se o método DFP é aplicado em $f(x)$, a sequência $\{f(x^k)\}$ ($k = 1, 2, \dots$) converge para o menor valor de $f(x)$.

O resultado de Dixon, de que os métodos quase-Newton geram a mesma sequência de pontos, estende a teoria de Powell para a fórmula BFGS.

Os resultados sobre convergência apresentados no parágrafo anterior, mostram que uma das dificuldades encontrada nos métodos quase-Newton era a necessidade de uma busca linear exata ser efetuada.

Um outro aspecto que dificultou bastante os trabalhos

de pesquisa sobre a convergência desses métodos foi o fato de que eles foram criados para minimizar uma função, por aproximações de funções quadráticas, e são estendidos para funções diferenciáveis em geral.

Por isso, nos últimos anos, muito interesse tem sido voltado para provar a convergência desses métodos e num recente trabalho, Powell [15] provou a convergência do algoritmo BFGS com o uso da busca linear aproximada, como veremos a seguir:

TEOREMA 5.3.2: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável e convexa sobre \mathbb{R}^n e admitamos que para um dado $x^0 \in \mathbb{R}^n$, o conjunto $L(x^0)$ é limitado, onde:

$$L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^0)\}$$

Suponhamos ainda que $\{x^k\}$ é gerada por

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k H_k g(x^k)$$

e λ_k e H_k sejam escolhidos por uma das seguintes maneiras:

- (a) Uma busca linear exata e a modificação DFP.
- (b) A busca linear dada por (3.2.1) e (3.2.2) e a modificação - BFGS.

Então, para toda matriz simétrica e positiva definida $H_0 \in L(\mathbb{R}^n)$ e $\epsilon > 0$, existe um $k > 0$, tal que $\| \nabla f(x^k) \| < \epsilon$.

Para finalizarmos este capítulo, vamos apresentar um resultado muito interessante sobre a ordem de convergência dos métodos BFGS e DFP, que foi demonstrado por Schuller em 1970 [16].

TEOREMA 5.3.3: Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável e con

vexa sobre \mathbb{R}^n de modo que, para todo x que satisfaz $f(x) \leq f(x^0)$ existe uma constante L tal que

$$\left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_i \partial x_j} \right] \leq L \|x - x^*\|, \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, n \\ j = 1, \dots, n \end{array}$$

Suponhamos que a sequência $\{x^k\}$ gerada pelos métodos BFGS e DFP converge para o limite x^* . Se existe $\epsilon > 0$ tal que, para todo $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\frac{\det(x^k - x^{k+1}, x^{k+1} - x^{k+2}, \dots, x^{k+n-1} - x^{k+n})}{\|x^k - x^{k+1}\| \cdot \|x^{k+1} - x^{k+2}\| \dots \|x^{k+n-1} - x^{k+n}\|} \geq \epsilon$$

(independência linear uniforme), então, a R-ordem de convergência de $\{x^k\}$ é a raiz positiva de

$$t^{n+1} - t^n - 1 = 0$$

CAPÍTULO VI
EXPERIÊNCIAS NUMÉRICAS

6.1.) INTRODUÇÃO:

Um dos problemas mais interessantes na implementação numérica de métodos do tipo quase-Newton é a escolha do parâmetro β na fórmula (3.2.2).

Pelo teorema de convergência de Powell (5.3.2) do capítulo anterior, sabemos que qualquer valor de β pode ser escolhido no intervalo $(\alpha, 1)$. Contudo, comumente aceitamos $\alpha = 10^{-4}$, como sendo uma boa escolha para esse parâmetro.

Várias experiências numéricas foram realizadas com diferentes valores de β entre 10^{-4} e 1, cujos resultados serão apresentados neste capítulo.

Agora, sabemos que um valor de β pequeno, implica numa busca unidimensional exigente. No entanto, um valor próximo a 1, reflete uma busca unidimensional que não procura energicamente o mínimo nessa direção.

Observa-se ainda que longe da solução parecem ser necessárias buscas unidimensionais mais estritas, para compensar o fato de que a iteração newtoniana sem relaxação, não garante progresso longe do mínimo. Reciprocamente, perto do mínimo, esta iteração com $\lambda = 1$ é eficiente, logo, uma busca unidimensional exigente não parece ser necessária.

As observações expostas anteriormente, puderam fornecer subsídios capazes de sugerir uma experimentação com β variável no processo dos métodos quase-Newton, onde o valor de β seria

pequeno longe da solução, tendendo para 1, quando perto da solução.

Na falta de outro tipo de medida, usaremos a norma do gradiente para avaliarmos a "distância" à solução.

A escolha "variável" de β_k foi feita através das fórmulas seguintes:

$$\text{Se } \|g(x^k)\| \geq \|g(x^0)\|, \quad \beta_k = 10^{-4}$$

$$\text{Se } \|g(x^k)\| = 0, \quad \beta_k = 0.99$$

Em outros casos,

$$\beta_k = -0.9899 \frac{\|g(x^k)\|}{\|g(x^0)\|} + 0.99$$

Dessa maneira, o valor de β_k será 10^{-4} no ponto inicial, 0.99 perto da solução, variando linearmente entre estes valores em situações intermediárias.

6.2) FUNÇÕES-TESTE UTILIZADAS NAS EXPERIÊNCIAS:

Nas experiências realizadas, utilizamos a sub-rotina VAL3A, do PACOTE DA HARWELL, que implementa o método BFGS, com a busca unidimensional descrita no parágrafo 3.2, do Capítulo III e matriz fatorizada.

Testamos o algoritmo para 11 valores fixos de β no intervalo $[10^{-4}, 0.99]$ e com β variável de acordo com a modificação sugerida anteriormente.

Para realizarmos esses testes, fizemos uso de vários pontos iniciais em cada função-teste, para que pudéssemos obser-

var melhor o comportamento do algoritmo.

As funções-teste que utilizamos são clássicas na literatura e foram usadas por vários autores.

Salientamos também, que a tolerância usada para o critério de parada da VAL3A foi 10^{-4} .

Na tabela 1, descrevemos todas as funções-teste utilizadas, com seus respectivos pontos-solução.

TABELA 1

FUNÇÃO	EXPRESSÃO ANALÍTICA	Nº DE VARIÁVEIS	SOLUÇÃO
ROSEBROCK	$f(x) = 100(x_2 - x_1^2) + (1 - x_1)^2$	2	$x^* = (1, 1)$ $f(x^*) = 0$
BANANA DE WOOD	$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 + 90(x_4 - x_3^2)^2 + (1 - x_3)^2 + 10.1[(x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2] + 19.8(x_2 - 1)(x_4 - 1)$	4	$x^* = (1, 1, 1, 1)$ $f(x^*) = 0$
QUÁRTICA DE POWELL	$f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_2 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$	4	$x^* = (0, 0, 0, 0)$ $f(x^*) = 0$
VALE HELICAL	$f(x) = 100([x_3 - 100(x_1, x_2)]^2 + [(x_1^2 - x_2^2)^{1/2} - 1]^2) + x_3^2$ onde $s(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \tan^{-1} \frac{x_2}{x_1}, & x_1 > 0 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \tan^{-1} \frac{x_2}{x_1}, & x_1 < 0 \end{cases}$	3	$x^* = (1, 0, 0)$ $f(x^*) = 0$
ELBA	$f(x) = \frac{1}{2} x^T G x$, onde $G_{ij} = \frac{1}{ i+j-1 }$ se $i \neq j$ $G_{ii} = n$, $i = 1, \dots, n$	N	$x^* = 0$ $f(x^*) = 0$
QUASE QUADRÁTICA	$f(x_{n-1}) = x_1^2 + HH e^{(x_1 - x_1 \cdot x_{1+1})}$, $i = 1, \dots, n-1$ $f(x) = f(x_{n-1}) + x_n^2 + HH e^{x_n}$ onde $HH = 1/\text{float}(N1)$ e $N1 = (n+1)^2$	N	$x^* = (*)$ $f(x^*) = 0.08$

(*) $x^* = (-0.03, -0.06, -0.09, -0.1, -0.1, -0.1, -0.1, -0.09, -0.06, -0.06)$

6.3) ANÁLISE DOS TESTES

Sabemos que o esforço computacional de um algoritmo para a sua convergência está diretamente ligado com o número de ite

rações e o seu trabalho por iteração. Porém, para medirmos a eficiência de um algoritmo, não podemos considerar esse esforço computacional como único fator de análise, visto que o sistema utilizado para as nossas experiências (PDP-10 da UNICAMP), apresenta "cargas de trabalho" bastante oscilatórias.

Devemos ainda ressaltar que com a modificação a que nos propomos fazer, acrescentamos ao algoritmo um número de operações bastante considerável, pois a cada iteração necessitamos calcular a norma do gradiente, implicando isto em um aumento do tempo de CPU para a convergência do algoritmo.

Baseados no exposto acima e com o objetivo de compararmos o algoritmo quando faz uso do β fixo, chamado VA13A, com o mesmo algoritmo usando o β variável que chamaremos VA14A, fizemos a análise dos resultados obtidos nas experiências numéricas realizadas.

Procuramos comparar para cada ponto inicial, o número de iterações, de avaliações da função e tempo de CPU necessários para a convergência do algoritmo nos dois testes.

Apresentamos, a seguir, as tabelas dos resultados obtidos para cada função e sua análise. Usaremos as seguintes notações:

X_i ($i = 1, \dots, 6$) - pontos iniciais.

I - número de iterações.

II - número de avaliações da função.

III - tempo de CPU.

TABELA 2
FUNÇÃO-TESTE: ROSENBROCK

β	x_1			x_2			x_3			x_4			x_5			x_6		
	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III
10^{-4}	30	64	0.151	34	83	0.188	20	44	0.121	33	69	0.149	25	67	0.166	50	114	0.240
0.1	24	53	0.116	49	105	0.229	15	28	0.087	27	58	0.123	32	61	0.151	42	79	0.182
0.2	23	51	0.123	44	90	0.225	18	38	0.113	32	58	0.137	24	53	0.130	42	91	0.183
0.3	26	50	0.124	42	88	0.210	22	39	0.103	31	51	0.122	32	56	0.146	44	81	0.181
0.4	26	46	0.128	50	87	0.211	22	40	0.112	33	55	0.138	32	57	0.137	42	71	0.195
0.5	26	46	0.122	51	81	0.224	25	38	0.108	34	54	0.134	35	54	0.141	44	72	0.184
0.6	27	43	0.118	54	87	0.215	25	35	0.108	32	49	0.119	36	55	0.152	48	78	0.216
0.7	32	46	0.120	57	76	0.235	27	35	0.097	38	48	0.139	40	52	0.163	50	73	0.206
0.8	37	40	0.130	59	77	0.247	29	38	0.108	38	42	0.139	41	55	0.170	59	78	0.235
0.9	37	40	0.153	61	80	0.242	29	41	0.113	38	42	0.139	41	55	0.174	66	74	0.242
0.99	37	40	0.149	75	88	0.274	35	41	0.148	45	50	0.159	49	58	0.198	70	79	0.257
VARIÁVEL	37	40	0.164	59	67	0.236	25	29	0.141	35	41	0.138	37	47	0.171	65	72	0.297

$$x_1 = (-1.2, 1)$$

$$x_2 = (-12, 10)$$

$$x_3 = (3, 2)$$

$$x_4 = (-2, 2)$$

$$x_5 = (-3, -4)$$

$$x_6 = (-7, 9)$$

Para o ponto (-120, 100) não houve convergência.

ANÁLISE DA TABELA 2

(1) Para esta função, podemos observar que em relação ao número de avaliações da função, a superioridade de VA14A sobre a VA13A, com qualquer valor de β , é indiscutível em todos os pontos testados.

(2) De uma maneira geral, a VA13A com um $\beta \geq 0.7$ e VA14A com qualquer outro valor de β , o mesmo acontecendo em relação ao tempo de CPU.

TABELA 3
FUNÇÃO-TESTE: BANANA DE WOOD

β	x_1			x_2			x_3			x_4			x_5			x_6		
	I	II	III	I	II	III	I	II	III									
10^{-4}	23	51	0.209	74	196	0.617	61	165	0.519	30	68	0.242	33	72	0.279	47	101	0.352
0.1	51	99	0.393	40	83	0.298	81	163	0.629	77	167	0.551	36	67	0.276	39	71	0.276
0.2	65	117	0.468	37	74	0.313	55	116	0.448	67	117	0.459	16	28	0.133	28	45	0.194
0.3	62	102	0.467	34	63	0.269	64	120	0.469	57	112	0.402	17	27	0.159	19	32	0.139
0.4	62	99	0.445	55	100	0.460	53	99	0.408	64	106	0.433	17	26	0.151	19	29	0.153
0.5	66	107	0.444	71	105	0.531	54	97	0.429	62	92	0.416	18	26	0.141	20	29	0.154
0.6	73	100	0.587	63	82	0.477	64	92	0.468	67	96	0.428	22	28	0.193	20	29	0.149
0.7	68	95	0.456	66	84	0.476	66	93	0.475	66	88	0.414	22	28	0.160	27	33	0.196
0.8	71	86	0.504	74	82	0.518	76	100	0.536	84	102	0.507	25	30	0.186	30	36	0.207
0.9	80	87	0.554	85	89	0.535	139	151	0.973	83	95	0.528	34	37	0.232	37	40	0.231
0.99	80	87	0.544	116	129	0.764	155	160	1.079	96	106	0.572	34	37	0.257	37	40	0.259
VARIÁVEL	31	76	0.233	69	74	0.538	139	149	0.965	39	44	0.279	36	42	0.311	55	64	0.378

$$x_1 = (-3, -1, -3, -1)$$

$$x_2 = (-30, -10, -30, -10)$$

$$x_3 = (-300, -100, -300, -100)$$

$$x_4 = (-6, -2, -6, -2)$$

$$x_5 = (3, 1, 3, 1)$$

$$x_6 = (3, -2, 3, -1)$$

ANÁLISE DA TABELA 3

(1) Podemos observar nesta tabela que, com exceção de $\beta = 10^{-4}$, a VAL4A é superior a VAL3A, tanto em tempo de CPU quanto em número de iterações e de avaliações da função, no que diz respeito aos pontos iniciais x_1 e x_4 .

(2) No ponto inicial x_2 , temos a observar que:

(a) A VAL4A converge em um número de iterações menor que a da VAL3A, para os valores de $\beta = 10^{-4}$, 0.5, 0.8, 0.9 e 0.99 e maior, para os outros valores de β .

(b) Em relação ao número de avaliações da função, com exceção de $\beta = 0.3$, a superioridade da VA14A é indiscutível.

(c) Quanto ao tempo de CPU, a VA14A é inferior a VA13A, com exceção de $\beta = 10^{-4}$, 0.99.

(3) Nos pontos X_3 , X_5 e X_6 , com algumas exceções, a execução da VA14A apresenta uma inferioridade sobre a VA13A.

TABELA 4
FUNÇÃO-TESTE: QUÁRTICA DE POWELL

A	x_1			x_2			x_3			x_4			x_5			x_6		
	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III
10^{-4}	33	92	0.311	57	162	0.511	77	215	0.655	56	151	0.443	49	129	0.385	40	110	0.366
0.1	24	47	0.215	43	93	0.412	60	148	0.485	46	99	0.338	33	68	0.245	32	68	0.277
0.2	38	79	0.313	53	111	0.447	85	184	0.713	35	72	0.265	30	58	0.231	24	48	0.207
0.3	32	64	0.273	49	98	0.410	71	150	0.561	38	78	0.291	35	70	0.272	29	58	0.238
0.4	34	66	0.302	48	93	0.376	77	151	0.601	37	72	0.277	41	82	0.308	29	58	0.241
0.5	40	57	0.346	69	102	0.459	93	134	0.677	44	62	0.308	43	77	0.309	22	29	0.163
0.6	47	54	0.308	67	87	0.436	90	116	0.564	48	62	0.317	55	70	0.366	25	28	0.185
0.7	46	53	0.338	74	95	0.513	89	119	0.615	48	58	0.330	63	70	0.398	25	28	0.187
0.8	49	55	0.392	64	77	0.424	88	128	0.634	56	64	0.366	52	56	0.378	25	28	0.197
0.9	56	59	0.431	93	95	0.604	121	141	0.764	64	69	0.397	58	61	0.369	25	28	0.178
0.99	56	59	0.435	109	111	0.697	139	142	0.905	83	85	0.519	58	60	0.396	25	28	0.189
VARIÁVEL	60	64	0.420	104	113	0.713	131	144	0.948	66	71	0.446	71	76	0.516	52	57	0.360

$$x_1 = (-3, -1, -3, -1)$$

$$x_3 = (-300, -100, -300, -100)$$

$$x_5 = (5, -7, 3, 1)$$

$$x_2 = (-30, -10, -30, -10)$$

$$x_4 = (-5, 5, -5, 5)$$

$$x_6 = (1, 1, 1, 1)$$

ANÁLISE DA TABELA 4

(1) Para esta função, notamos que com os pontos iniciais X_1 , X_5 e X_6 a VA13A, converge em um número de iterações e de avalia-

ções da função menores do que os obtidos pela VA14A.

- (2) Analisando os resultados dos pontos iniciais x_2 , x_3 e x_4 , podemos observar que a VA14A é melhor que a VA13A com $\beta = 0.99$, entretanto, o mesmo não acontece se compararmos com a VA13A - com β , variando no intervalo $[10^{-4}, 0.9]$.
- (3) Quanto ao tempo de CPU, em todos os pontos iniciais testados, o trabalho computacional da VA14A é maior que o da VA13A.

TABELA 5
FUNÇÃO TESTE: VALE HELICAL

β	x_1			x_2			x_3			x_4			x_5			x_6		
	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III	I	II	III
10^{-4}	23	45	0.168	21	48	0.165	63	147	0.428	31	72	0.226	30	70	0.200	44	105	0.320
0.1	24	41	0.169	19	36	0.132	18	40	0.132	37	77	0.231	32	67	0.211	22	45	0.157
0.2	24	41	0.154	18	34	0.136	17	37	0.136	36	75	0.216	31	63	0.201	21	42	0.164
0.3	25	42	0.164	18	34	0.120	18	36	0.123	35	59	0.201	32	58	0.198	20	40	0.151
0.4	26	40	0.169	18	35	0.137	18	36	0.138	35	59	0.212	32	57	0.201	20	41	0.152
0.5	24	39	0.153	18	35	0.123	16	34	0.122	38	59	0.231	32	55	0.186	30	49	0.187
0.6	31	42	0.183	20	37	0.121	16	34	0.123	40	58	0.218	33	43	0.179	34	54	0.191
0.7	28	37	0.169	23	38	0.136	20	35	0.138	40	64	0.230	27	43	0.168	31	46	0.173
0.8	28	33	0.168	36	47	0.194	42	64	0.230	39	52	0.212	34	47	0.185	32	45	0.181
0.9	23	28	0.135	39	50	0.218	51	70	0.283	58	77	0.309	45	55	0.248	34	45	0.200
0.99	27	31	0.148	44	46	0.235	64	77	0.318	71	85	0.352	45	52	0.226	35	40	0.199
VARIÁVEL	34	41	0.214	37	50	0.227	33	42	0.226	45	57	0.258	44	55	0.249	36	45	0.231

$$x_1 = (2, 3, -2)$$

$$x_3 = (200, 300, -200)$$

$$x_5 = (-5, 7, -2)$$

$$x_2 = (20, 30, -20)$$

$$x_4 = (-2, -3, 2)$$

$$x_6 = (10, -14, 4)$$

ANÁLISE DA TABELA 5

Em relação a esta tabela, temos a observar que:

- (1) Quanto ao número de iterações, de avaliações da função e tempo de CPU, no ponto inicial X_1 , a VAL4A é inferior a VAL3A.
- (2) No ponto X_2 , a VAL4A é superior a VAL3A, com $\beta = 0.9$ e 0.99 , tanto em número de iterações quanto em número de avaliações da função.
- (3) Em X_3 , a superioridade da VAL4A se observa também em relação aos $\beta = 0.1, 0.8, 0.9, 0.99$, tanto quanto ao número de iterações como ao de avaliações da função.
- (4) Nos pontos X_4 e X_5 , a superioridade da VAL4A é verificada - mais em relação ao número de avaliações de funções que ao número de iterações.
- (5) Com respeito ainda ao número de avaliações da função, a superioridade da VAL4A é verificada também no ponto X_6 , embora se ja inferior em relação ao número de iterações.
- (6) De uma maneira geral, o tempo de CPU é um pouco maior quando executamos a VAL4A.

ANÁLISE DA TABELA 6

- (1) Observamos que para os pontos iniciais X_4, X_5 e X_6 , o comportamento da VAL4A coincide com o da VAL3A, quando usamos os valores de β menores que 0.6 .
- (2) No ponto X_1 , o comportamento da VAL4A também é o mesmo da VAL3A com os valores de $\beta = 10^{-4}, 0.1, 0.2, 0.99$, sendo inferior em relação aos demais valores de β .

TABELA 6
FUNÇÃO-TESTE: ELBA (n = 18)

β	X_1			X_2			X_3			X_4			X_5			X_6		
	I	II	III															
10^{-4}	14	22	0.405	36	80	0.827	12	33	0.413	5	13	0.184	5	11	0.182	11	18	0.328
0.1	14	22	0.380	8	15	0.230	14	31	0.396	5	13	0.184	5	11	0.170	11	18	0.362
0.2	14	22	0.408	8	15	0.248	13	26	0.379	5	13	0.184	5	11	0.168	11	18	0.349
0.3	12	18	0.332	7	11	0.193	11	21	0.321	5	13	0.184	5	11	0.169	11	18	0.348
0.4	12	18	0.330	7	10	0.184	12	22	0.349	5	13	0.184	5	11	0.170	11	18	0.303
0.5	12	18	0.320	7	10	0.185	11	20	0.320	5	13	0.184	5	11	0.169	15	21	0.445
0.6	12	18	0.343	7	10	0.184	11	19	0.321	6	15	0.200	10	16	0.255	15	21	0.462
0.7	12	18	0.332	7	10	0.185	11	19	0.328	6	15	0.200	10	16	0.291	15	21	0.474
0.8	12	18	0.343	7	10	0.195	13	19	0.358	8	17	0.261	10	16	0.277	15	21	0.406
0.9	12	18	0.327	7	10	0.204	13	19	0.342	16	28	0.425	10	16	0.273	15	21	0.414
0.99	14	20	0.376	8	10	0.231	17	20	0.415	19	30	0.474	14	18	0.347	15	20	0.382
VARIÁVEL	14	22	0.392	17	11	0.209	15	20	0.404	5	13	0.200	5	11	0.195	11	18	0.354

$$X_1 = (-5, 2, -1, 3, 0, -4, 7, 1, 5, -3)$$

$$X_2 = (-50, 20, -10, 30, 0, -40, 70, 10, 50, -30)$$

$$X_3 = (-500, 200, -100, 300, 0, -400, 700, 100, 500, -300)$$

$$X_4 = (-1, 1, -1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1)$$

$$X_5 = (-10, 10, -10, 10, 10, -10, 10, 10, 10, -10)$$

$$X_6 = (-1, -3, -5, -4, -2, -8, -2, -7, -9, -1)$$

(3) Para os valores de $\beta = 0.3, 0.4, \dots, 0.9$, existe uma coincidência entre o comportamento da VAL3A e da VAL4A, em relação ao ponto X_2 .

(4) Quanto ao ponto X_3 , a VAL3A tem um comportamento bastante variado para os diversos valores de β testados. Em comparação com a VAL4A, verificamos apenas que têm um comportamento parecido quando $\beta = 0.99$.

ANÁLISE DA TABELA 7

(1) As mesmas observações da Tabela 6 são válidas com relação aos pontos X_4, X_5 e X_6 .

TABELA 8
FUNÇÃO-TESTE: QUASE QUADRÁTICA (N = 19)

β	X_1			X_2			X_3			X_4			X_5			X_6		
	I	II	III															
10^{-4}	14	27	0.410	17	36	0.636	33	83	1.173	15	35	0.441	17	30	0.448	19	42	0.535
0.1	14	23	0.394	17	31	0.473	40	87	1.239	16	27	0.402	17	30	0.445	19	38	0.534
0.2	14	23	0.396	16	30	0.468	27	59	0.828	15	24	0.382	17	30	0.440	15	28	0.426
0.3	14	23	0.379	15	25	0.440	34	65	0.973	15	24	0.371	16	26	0.452	17	28	0.477
0.4	14	23	0.408	15	25	0.418	31	58	0.960	17	26	0.412	16	25	0.446	17	25	0.467
0.5	14	22	0.437	16	25	0.452	33	52	0.922	16	24	0.394	17	24	0.447	17	25	0.422
0.6	14	21	0.403	18	23	0.455	34	59	0.979	16	24	0.387	17	24	0.415	27	29	0.626
0.7	14	21	0.380	26	29	0.566	51	62	1.254	16	24	0.402	17	24	0.416	29	32	0.654
0.8	14	21	0.397	26	29	0.543	57	65	1.405	21	32	0.514	17	24	0.438	30	32	0.719
0.9	17	21	0.417	22	24	0.507	57	61	1.261	21	32	0.472	19	25	0.437	30	32	0.682
0.99	17	21	0.398	29	30	0.663	63	65	1.445	18	25	0.432	19	25	0.444	30	32	0.665
VARIÁVEL	14	21	0.430	26	29	0.542	56	62	1.292	19	27	0.474	19	29	0.525	22	30	0.539

$$x_1 = (-1, -3, -5, -4, -2, -8, -2, -7, -9, -1)$$

$$x_2 = 10 \cdot x_1$$

$$x_3 = 100 \cdot x_1$$

$$x_4 = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$$

$$x_5 = (-5, 2, -1, 3, 0, -4, 7, 1, 5, -3)$$

$$x_6 = (10, 10, 10, 10, 10, 10, 10, 10, 10, 10)$$

liações da função (com relação a todos os valores de β).

- (2) Nos pontos X_2 , X_3 , X_4 e X_5 , notamos que, em poucos casos, a VA14A apresenta uma melhora em relação a VA13A (em relação a todos os valores de β).
- (3) Com relação ao ponto X_6 , a VA14A é superior quando comparado com a VA13A, com $\beta \geq 0.6$.

CONCLUSÕES

Os resultados das experiências numéricas que realizamos e que estão apresentados nas tabelas 2,3,...,8 não fornecem uma conclusão definitiva sobre a eficiência relativa do método com β variável (VA14A) em relação aos β fixos (VA13A).

Também, não aparece uma conclusão clara sobre qual é o β fixo mais razoável que pudesse ser usado no algoritmo, para qualquer função a ser minimizada. Podemos observar ainda que todas as eficiências relativas parecem altamente dependentes da função que está sendo considerada.

Em relação a implementação do método com β variável, seria necessário "medir" a "distância" entre x^k e x^* , com uma quantidade melhor que a norma do gradiente ($\|g(x^k)\|$), visto que perto de pontos de sela esta medida também é pequena e onde, seguramente, uma busca mais exigente seria necessária. Isto é o que provoca o comportamento fraco do método com β variável na função "banana de Wood".

BIBLIOGRAFIA

- [1] AVRIEL, M.: *Nonlinear Programming - Analysis and Methods*, Prentice-Hall, INC (Ed), Englewood Cliffs, N.J., 1976.
- [2] BRODLIE, K.W.: *Unconstrained minimization*, em the State of the Art in Numerical Analysis, D. Jacobs (Ed), Academic Press, New York, 1977.
- [3] BROYDEN, C.G.; DENNIS, J.E. e MORE, J.J.: *On the local and superlinear convergence of quasi-Newton methods*, J. Inst. Maths.Applics. 12, 223-245, 1973.
- [4] DAVIDON, W.C.: *Variable metric method for minimization*, AEC Research and Development Report ANL - 5990 (Rev.), November 1959.
- [5] DENNIS, J.E. e MORE, J.J.: *A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods*, Math. Comp. 28, 549-560, 1974.
- [6] DENNIS, J.E. e MORE, J.J.: *Quasi-Newton methods, motivation and theory*, SIAM Review 19, 46-88, 1977.
- [7] FLETCHER, R.: *A new approach to variable metric algorithms*, Computer J. 13, 317-322, 1970.
- [8] FLETCHER, R. e REEVES, C.M.: *Function minimization by conjugate gradients*, Computer J. 7, 149-154, 1964.
- [9] GILL, P.E.; GOLUB, G.H.; MURRAY, W. e SAUNDERS, M.A.: *Methods for modifying matrix factorizations*, Math. Comp. 28, 505-535, 1972.
- [10] GOLDFARB, D.: *Factorized variable metric methods for unconstrained optimization*, Math. Comp. 30, 796-811.
- [11] LENARD, M.L.: *Practical convergence conditions for the Davidon-Fletcher-Powell method*, Math. Prog. 9, 69-86, 1975.

- [12] LUEMBERG, D.G.: *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, parte 2, Addison-Wesley, 1973.
- [13] MURRAY, W.: *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*, London Academic, 1972.
- [14] ORTEGA, J.M. e RHEINBOLDT, W.C.: *Iterative Solution of Non-linear Equations in Several Variables*, Academic Press, New York, 1970.
- [15] POWELL, M.J.D.: *On the convergence of the variable metric algorithms*, J. Inst. Maths. Applics. 7, 21-36, 1971.
- [16] POWELL, M.J.D.: *Some global convergence properties of a variable metric algorithm for minimization without exact line searches*, Report CSS 15, AERE Harwell, 1975.
- [17] SCHULLER, G.: *On the order of convergence of certain quasi-Newton methods*, Num. Math. 23, 181-192, 1974.
- [18] WILKINSON, J.H.: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, D.U.P., London, 1965.