3.4 – Métodos Quase-Newton: O Método de Broyden

A motivação central dos métodos quase-Newton é gerar uma seqüência $\{x^{(k)}\}$ com boas propriedades de convergência, sem no entanto avaliar a matriz Jacobiana a cada iteração, como é necessário no método de Newton.

Um exemplo é o método de Newton modificado que requer o cálculo da matriz Jacobiana apenas na iteração inicial, porém a propriedade de taxa quadrática é perdida e em seu lugar consegue-se apenas taxa linear.

A seqüência $\{x^{(k)}\}$, nos métodos quase-Newton, é gerada através da fórmula:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$$

onde $s^{(k)}$ é a solução do sistema linear:

$$B^{(k)}s^{(k)} = -F\left(x^{(k)}\right).$$

Nos métodos quase-Newton que estudaremos nesta seção, as matrizes $B^{(k)}$ são atualizadas a cada iteração e é imposta a condição de que tais matrizes satisfaçam a seguinte equação:

$$B^{(k+1)}\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right) = F\left(x^{(k+1)}\right) - F\left(x^{(k)}\right)$$

devido à seguinte motivação:

conhecidos $x^{(k)}$, $F(x^{(k)})$, $x^{(k+1)}$, $F(x^{(k+1)})$, o modelo linear:

$L_{k+1}(x) = F(x^{(k+1)}) + B^{(k+1)}(x - x^{(k+1)})$

pode ser considerado uma aproximação para $F(x)$ em torno de $x^{(k+1)}$, e a igualdade $L_{k+1}(x^{(k+1)}) = F(x^{(k+1)})$ é satisfeita para qualquer escolha para $B^{(k+1)}$.

Colocando ainda a condição:

$L_{k+1}(x^{(k)}) = F(x^{(k)})$

teremos:

$L_{k+1}(x^{(k)}) = F(x^{(k+1)}) + B^{(k+1)}(x - x^{(k+1)}) = F(x^{(k)})$

e, portanto,

$B^{(k+1)}(x - x^{(k+1)}) = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)})$.

Se $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ e $y^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)})$, a equação acima fica:

$B^{(k+1)}\, s^{(k)} = y^{(k)}$

que é conhecida como *equação secante* e, por esta razão tais métodos são também chamados de *métodos secantes*.

É importante observar que o método da secante estudado anteriormente consiste em se tomar como aproximação da função $f(x)$, na iteração k, a reta $r(x)$ que passa pelos pontos $(x_k, f(x_k))$ e $(x_{k+1}, f(x_{k+1}))$:

$$r(x) = f(x_{k+1}) + b(x - x_{k+1})$$

e, impondo as condições:

$r(x_k) = f(x_k)$ e $r(x_{k+1}) = f(x_{k+1})$

obtemos:

$$b = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k} \Rightarrow bs_k = y_k$$

e b satisfaz a equação secante.

Neste caso, existe uma única escolha para b de forma que as condições de $r(x_k) = f(x_k)$ e $r(x_{k+1}) = f(x_{k+1})$ sejam satisfeitas.

Mas, para $n > 1$, a equação secante não é suficiente para determinar uma única matriz, uma vez que são n equações e n^2 variáveis (os elementos da matriz $B^{(k+1)}$).

Os métodos quase-Newton diferem entre si pelas condições adicionais impostas sobre $B^{(k+1)}$, tais como:

- obedecer a algum princípio de variação mínima em relação a $B^{(k)}$;
- preservar alguma estrutura especial da matriz Jacobiana, como simetria e esparsidade.

Deve-se determinar $B^{(k+1)}$ a qual representa uma boa aproximação para $J(x^{(k+1)})$.

Considerando-se $B^{(k+1)} = B^{(k)} + A^{(k)}$, deve-se determinar $A^{(k)}$, a qual satisfaça: $B^{(k+1)} s^{(k)} = y^{(k)}$, ou seja, $(B^{(k)} + A^{(k)}) s^{(k)} = y^{(k)}$.

A partir desta última condição, expressando-se $A^{(k)}) = u^{(k)}(s^{(k)})^T$, determina-se $u^{(k)}$ por:

$$u^{(k)} = \frac{\left(y^{(k)} - B^{(k)}s^{(k)}\right)}{\left(s^{(k)}\right)^T s^{(k)}}.$$

3.4.1- <u>O Método de Broyden</u>

A fórmula para $B^{(k+1)}$, proposta por Broyden em 1965, é a seguinte:

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + A^{(k)} = B^{(k)} + u^{(k)}(s^{(k)})^T.$$

Existem vários outros métodos quase-Newton e é importante ressaltar que em vários deles, além de se evitar o cálculo da matriz Jacobiana, o esforço computacional necessário para a resolução do sistema linear é reduzido em relação ao esforço realizado no método de Newton .

3.4.2- <u>Algoritmo para o método Quasi-Newton proposto por Broyden</u>

Passo 1: para $k = 0$, dado o ponto $x^{(0)}$, resolva o sistema linear:

$B^{(0)}s^{(0)} = -F(x^{(0)})$, onde $B^{(0)} = J(x^{(0)})$, para determinar $s^{(0)}$ e calcular:
$x^{(1)} = x^{(0)} + s^{(0)}$
$y^{(1)} = F(x^{(1)}) - F(x^{(0)})$.

Determine $u^{(0)} = \dfrac{\left(y^{(0)} - B^{(0)}s^{(0)}\right)}{\left(s^{(0)}\right)^T s^{(0)}}$ e calcule:

$A^{(0)} = u^{(0)} (s^{(0)})^T$ e $B^1 = B^0 + A^{(0)}$;

Atualize: $s^{(0)}$ resolvendo $B^{(1)}s^{(0)} = y^{(0)}$ e
$x^{(1)} = x^{(0)} + s^{(0)}$.

Se critério de parada estiver satisfeito, então pare, senão, faça k = k+1 e vá para o passo 2.

Passo 2:

Calcule:
$B^{(k)}s^{(k)} = -F(x^{(k)})$, para determinar $s^{(k)}$ e calcular:
$x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$
$y^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)})$.

Determine $u^{(k)} = \dfrac{\left(y^{(k)} - B^{(k)}s^{(k)}\right)}{\left(s^{(k)}\right)^T s^{(k)}}$ e calcule:

$A^{(k)} = u^{(k)} (s^{(k)})^T$ e $B^{k+1} = B^k + A^{(k)}$;

Atualize: $s^{(k)}$ resolvendo $B^{(k+1)}s^{(k)} = y^{(k)}$ e
$x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$.

Passo 3:

Critério de parada: se $\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\| < \varepsilon$, faça $\bar{x} = x^{(k+1)}$ e pare;

Caso contrário:

Faça k = k + 1 e volte ao passo 2.

3.4.3- Exercícios

3.4.3.1) Usando alguma linguagem de programação, faça um programa para o método de Newton e para o método de Newton Modificado.

3.4.3.2) Resolva os sistemas não-lineares abaixo usando seus programas para os métodos de Newton e Newton Modificado com $\varepsilon = 10^{-4}$.

a) $\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0 \\ e^{x_1 - 1} + x_2^3 - 2 = 0 \end{cases}$ $x^{(0)} = (1.5, 2.0)^T$

b) $\begin{cases} 4x_1 - x_1^3 + x_2 = 0 \\ \dfrac{-x_1^2}{9} + \dfrac{4x_2 - x_2^2}{4} = -1 \end{cases}$ $x^{(0)} = (-1, -2)^T$

c) $\begin{cases} \dfrac{2x_1 - x_1^2 + 8}{9} + \dfrac{4x_2 - x_2^2}{4} = 0 \\ 8x_1 - 4x_1^2 + x_2^2 + 1 = 0 \end{cases}$ $\quad x^{(0)} = (-1, -1)^T$

d) (Função de Rosenbrock) [24]

$\begin{cases} 10\left(x_2 - x_1^2\right) = 0 \\ 1 - x_1 = 0 \end{cases}$ $\quad x^{(0)} = (-1.2, 1)^T$

e) (Broyden Tridiagonal) [24]

$\begin{cases} f_1(x) = (3 - 2x_1)x_1 - 2x_2 + 1 = 0 \\ f_i(x) = (3 - 2x_i)x_i - x_{i-1} - 2x_{i+1} + 1 = 0, & i = 2, ..., 9 \\ f_{10}(x) = (3 - 2x_{10})x_{10} - x_9 + 1 = 0 \end{cases}$

$x^{(0)} = (-1, -1, ..., -1)^T$

f) (Função Trigexp de Toint) [29]

$\begin{cases} f_1(x) = 3x_1^3 + 2x_2 - 5 + \mathrm{sen}(x_1 - x_2)\mathrm{sen}(x_1 + x_2) = 0 \\ f_i(x) = -x_{i-1}e^{(x_{i-1} - x_i)} + x_i\left(4 + 3x_i^2\right) + 2x_{i+1} + \mathrm{sen}(x_i - x_{i+1})\mathrm{sen}(x_i + x_{i+1}) - 8 = 0 \\ f_{10}(x) = -x_9 e^{(x_9 - x_{10})} + 4x_{10} - 3 = 0 \end{cases}$

$i = 2, ..., 9$

$x^{(0)} = (0, 0, ..., 0)^T$

3.4.3.3) Faça pelo menos duas iterações para os itens do exercício 3.4.3.2) através do Método de Broyden.

3.4.3.4) O método de Newton pode ser aplicado para a resolução de um sistema linear $Ax = b$. Neste caso, quantas iterações serão realizadas? Por quê?