



MS 512 - Análise Numérica

MÉTODO DE BROYDEN

E

SUBESPAÇOS DE KRYLOV

1. Método de Broyden

Muitos métodos iterativos para encontrar soluções aproximadas de sistemas não-lineares,

$$F(x) = 0, \quad F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad (1)$$

têm a forma

$$\begin{cases} p^k = -H^k F(x^k), \\ x^{k+1} = x^k + p^k t^k, k = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2)$$

onde H^k é uma matriz $n \times n$ e t^k é um escalar. Por exemplo, se $H^k = (F'(x^k))^{-1}$ e $t^k = 1$, então (2) define exatamente o método de Newton (verifique!).

Desta maneira, a matriz H^k pode ser “construída” para cumprir certas condições não *ad hoc* - i.e., matematicamente naturais - tais que algumas propriedades de H^k sejam compatíveis ou consistentes com aquelas da matriz $[F'(x^k)]$. Tais métodos, chamados quase-Newton, são referidos como variantes do método de newton. Aqui iremos estudar um método particular, e representativo, da classe quase-Newton, a saber, o método de Broyden.

Com efeito, o método de Broyden pode reduzir por uma ordem $O(n)$ de grandeza sobre o número de operações envolvidas para a solução de (1), quando comparado com o método de newton, i.e, de $O(n^2)$ para $O(n)$ sobre o número de avaliações das funções não lineares e de $O(n^3)$ para $O(n^2)$ sobre as operações envolvidas na resolução do sistema linear em cada iteração do método de newton.

Para a construção do método de Broyden temos como hipóteses:

1. F é continuamente diferenciável em algum conjunto aberto $D \subset \mathbb{R}^n$.
2. Para um dado $x \in D$ e dado $s \neq 0$, temos $x^+ = x + s \in D$.

Para efeito de notação na discussão que segue, e sem perda de generalidade, vamos associar:

$$x \text{ com } x^k \quad \text{e} \quad x^+ \text{ com } x^{k+1}.$$

E vamos procurar por uma boa aproximação para a matriz jacobiana ($F'(x^k)$). Com efeito, uma vez que F' é contínua em x^+ , dado $\varepsilon > 0$ existe um $\delta > 0$ tal que:

$$\|F(x) - F(x^+) - F'(x^+)(x - x^+)\| < \varepsilon \|x - x^+\|.$$

Desde que $\|x - x^+\| < \delta$. Daí segue de imediato p modelo linear local, tal que

$$F(x) \approx F(x^+) + F'(x^+)(x - x^+),$$

com essa aproximação “melhorando” na medida que $\|x - x^+\|$ decresce.

Por essa razão, se tomarmos B^+ como uma aproximação conveniente para a matriz jacobiana $F'(x^+)$, é então natural exigir que B^+ satisfaça identicamente

$$F(x) = F(x^+) + B^+(x - x^+),$$

ou seja

$$B^+s = y = F(x^+) - F(x), \quad s = x^+ - x. \quad (3)$$

A equação (3), chamada de equação secante, ou de equação quase-Newton, é crucial para o desenvolvimento de métodos da classe quase-newton.

Observação: Se $n = 1$ (caso escalar) então a equação (3) determina completamente (e de forma única) B^+ , e daí somos conduzidos ao método da secante.

$$f'(x_{k+1}) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k} = B^+. \quad (4)$$

Para $n > 1$, a equação quase-newton (3) significa uma aproximação da variação em $F(x)$ na direção $S = x^+ - x$. Agora suponha que nós temos uma aproximação B para $F'(x)$, i.e, $B \approx F'(x)$. Broyden (c.g. Broyden, A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations, mathematics of computation, vol 19(92), 1965, pp 577-593) supôs que a aproximação $B^+ \approx F'(x^+)$ produz o mesmo efeito da matriz B , em qualquer direção ortogonal ao vetor s .

Com base nesse argumento, podemos então supor que

$$B^+z = Bz, \quad \text{se } Z^T s = 0, \quad (5)$$

Acontece que as equações (3) e (5) determinam unicamente a matriz B^+ , a partir de B . Com efeito, considere a matriz

$$A = \frac{(y - Bs)}{s^t s} s^t,$$

Com $y = B^+s$ dado por (3).

Seja $v \in \mathbb{R}^n$, então construa $v = z + as$ para algum escalar $a \in \mathbb{R}$, porque

$$\mathbb{R}^n = \text{span}\{s, z_1, z_2, \dots, z_{n-1}\}, \quad (*)$$

onde z_1, z_2, \dots, z_{n-1} , são ortogonais com relação ao vetor s e também vale que,

$$z = \sum_{i=1}^{n-1} c_i z_i. \quad (**)$$

Note que (*) – (**) são consequências naturais das hipóteses de Broyden (1965). Então,

$$Av = A(z + as) = \frac{(y - Bs)s^T}{s^T s}(z + as) = \frac{(y - Bs)(s^T z + as^T s)}{s^T s}.$$

Note que pela hipótese de Broyden $s^T z = 0$.

$$\Rightarrow \frac{(y - Bs)(s^T z + as^T s)}{s^T s} = \frac{a(y - Bs)s^T s}{s^T s} = a(B^+ s - Bs) = aB^+ s - aBs.$$

Lembre-se que $B^+ z = Bz$ e então $B^+ z - Bz = 0$. Isso não implica que $B^+ = B$! Temos que,

$$aB^+ s - aBs = B^+ as + B^+ z - Bz - Bas = B^+(z + as) - B(z + as).$$

Faça $z + as = v$, portanto, $B^+(z + as) - B(z + as) = (B^+ - B)v$.

Uma vez que $Av = (B^+ - B)v$ para todo $v \in \mathbb{R}^n$ segue de imediato que $A = B^+ - B$.

Desta maneira,

$$B^+ = B + \frac{(y - Bs)s^T}{s^T s}. \quad (6)$$

A equação (6) fornece o que é conhecido como o **procedimento de atualização de Broyden** para a aproximação da matriz Jacobiana $F(x)$ associada ao modelo linear local.

Uma maneira alternativa de verificar a construção da matriz B^+ a partir de B é como segue,

$$B^+ = B + v \frac{1}{s^T s} s^T.$$

Sendo v um vetor arbitrário, não nulo, i.e., B^+ é simplesmente uma **perturbação de B** por uma **matriz de posto unitário**

Teorema 1. Rank-One matrices (Matriz de posto unitário) *Seja $x, y \in \mathbb{R}^n$, ou \mathbb{C}^n com $x \neq 0$ e $y \neq 0$, então qualquer matriz da forma*

$$W = xy^T = \begin{bmatrix} x_1y_1 & x_1y_2 & x_1y_3 & \cdots \\ x_2y_1 & x_2y_2 & x_2y_3 & \cdots \\ x_3y_1 & x_3y_2 & x_3y_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Tem posto unitário, ou seja, suas colunas geram um espaço de dimensão 1. Reciprocamente, qualquer matriz de posto unitário W pode ser representada na forma xy^T .

Matrizes com posto unitário aparecem com frequência em aplicações numéricas e é importante conhecer como lidar com tais matrizes (ver e.g., G. W. Stewart, Afternotes on Numerical Analysis)

Teorema 2. *Seja $A \in M_n$, com $n \geq 2$. Uma matriz de posto unitário. Então*

1. *Existem vetores $x, y \in \mathbb{C}^n$; $x, y \neq 0$ tais que $A = xy^T$;*
2. *A tem no máximo um autovalor não nulo com multiplicidade algébrica 1;*
3. *O autovalor do item anterior é $y^T x$;*
4. *x é o autovetor à direita e y é o autovetor à esquerda correspondente ao autovalor do item 2*

Retomando B^+ é uma perturbação de B pela matriz unitária

$$\frac{vs^T}{s^T s}.$$

Tal que $B^+s = Bs + v$, mas $B^+w = Bw$ para todo w com $s^T w = 0$, que é a hipótese de Broyden. Claramente, nós poderemos ver então que, para $B^+s = y$, nós queremos ter que $v = y - Bs$

Uma outra maneira de verificar (6) consiste em uma "boa" escolha para B^+ (sujeita a condição que B^+ satisfaz a equação (3)), i.e., que B^+ dado por (6) é a matriz mais próxima de B na norma euclidiana a partir de todas as matrizes que satisfazem (3). Isso é posto no seguinte resultado

Proposição 1. *Dada uma matriz $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $y \in \mathbb{R}^n$ e algum vetor não nulo $s \in \mathbb{R}^n$, e defina B^+ por (6). Então B^+ é a única solução para o problema $\min\{\|\hat{B} - B\|_E | \hat{B}s = y\}$, onde $\|A\|_E^2 = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2$.*

Demonstração. Para mostrar que B^+ é a solução, note que se $y = \hat{B}s$, então

$$\|B^+ - B\|_E = \|(\hat{B} - B) \frac{1}{s^T s} s s^T\|_E \leq \|B^+ - B\|_E \frac{\|s s^T\|_E}{s^T s} = \|\hat{B} - B\|_E. \quad (7)$$

E daí segue da equação (6), ou seja, a definição da atualização de Broyden (existência). Para mostrar que B^+ é a única solução faremos uso do seguinte argumento: Suponha que B_1 e B_2 são duas soluções e $B_1 \neq B_2$, i.e.,

$$\|B_1 - B\|_E \leq \|\hat{B} - B\|_E \text{ e } B_1 s = y,$$

E

$$\|B_2 - B\|_E \leq \|\hat{B} - B\|_E \text{ e } B_2 s = y,$$

Para todo \hat{B} que satisfaz $\hat{B}s = y$. Seja agora $B^* = \lambda B_1 + (1 - \lambda)B_2$, onde λ é qualquer número tal que $0 < \lambda < 1$. Então

$$B^* s = y.$$

E

$$\|B^* - B\|_E = \|\lambda(B_1 - B) + (1 - \lambda)(B_2 - B)\|_E < \lambda\|(B_1 - B)\|_E + \|(1 - \lambda)(B_2 - B)\|_E \leq \|\hat{B} - B\|_E. \quad (8)$$

Com efeito, a prova de que a primeira desigualdade estrita depende do seguinte fato $(B_1 - B) \neq \lambda(B_2 - B)$, para qualquer λ , segue do seguinte argumento:

Em geral, se A e B são matrizes não nulas $n \times n$ ($n > j$), $A \neq \alpha B$ para qualquer escalar α , com $0 < \lambda < 1$, então vale que (verifique os detalhes):

$$\|\lambda A + (1 - \lambda)B\|_E < \lambda\|A\|_E + (1 - \lambda)\|B\|_E.$$

Segue agora que,

$$\|B^* - B\|_E < \|\hat{B} - B\|_E.$$

Que é uma contradição quando $\hat{B} = B^*$. Desta maneira B^+ é única. □

Resumo do Algoritmo de Broyden

Nós passamos agora a discutir como as equações (3) e (6) podem ser utilizadas em um método iterativo para a resolução numérica do sistema linear $F(x) = 0$. Assim, o método de Broyden é dado pela equação sequencial das fórmulas

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - B_k^{-1} F(x^{(k)}) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

$$y^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)}) \quad s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}. \quad (10)$$

$$B_{k+1} = B_k + \frac{[y^{(k)} - B_k s^{(k)}] s^{(k)T}}{s^{(k)T} s^{(k)}}. \quad (11)$$

Fica claro que, dado $x^{(0)}$ e B_0 (Seja $F'(x^{(0)})$) ou uma "boa" aproximação para $F'(x^{(0)})$, o método de Broyden pode ser executado com (verifique!) n avaliação de funções escalares por tempo de iteração, ou seja, o método de Broyden requer somente a avaliação de $F(x^{(k+1)})$ (sem a necessidade de cálculos de derivadas parciais!) em cada nível de iteração. Entretanto, parece que ainda é necessário a resolução de um sistema linear a saber,

$$B_k s^{(k)} = -F(x^{(k)})$$

Por cada iteração. Com efeito, podemos superar tal dificuldade pelo uso do resultado de Sherman e Morrison (1949 & 1950), que será descrito a seguir mas vamos precisar primeiro do seguinte lema

Lema 1. *Seja $v, w \in \mathbb{R}^n$ dados. Então*

$$\det(I + vw^T) = 1 + w^T v. \quad (12)$$

Demonstração. Tome $P = I + vw^T$. Se $v = 0$, o resultado é imediato. Então suponha que $v \neq 0$. Tome z um autovetor de P , i.e., $(I + vw^T)z = \lambda z$ para algum λ . Então segue de imediato: $(1 - \lambda)z = -(w^T z)v$, i.e., z ou é ortogonal ao vetor w , ou z é um múltiplo do vetor v . (Desta maneira note que existem $(n - 1)$ autovetores que são ortogonais ao vetor w .)

Se $w^T z = 0$, então $\lambda = 1$, enquanto que se z é paralelo ao vetor v , temos que $\lambda = 1 + w^T v$; desta maneira os autovalores de P são todos 1, exceto pelo único autovalor que tem valor $1 + w^T v$. Desta maneira. A equação (12) segue imediato de

$$\det(P) = \prod_{i=1}^n \lambda_i = 1 + w^T v.$$

□

Lema 2. *A Fórmula de Sherman-Morrison. Sejam $u, v \in \mathbb{R}^n$ e suponha que a matriz A $n \times n$ é não singular. Então $A + uv^T$ é não singular se e somente se:*

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

Mais que isso, se $\sigma \neq 0$ então

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{\sigma} A^{-1} uv^T A^{-1}. \quad (13)$$

Demonstração. Uma vez que $\det(A + uv^T A^{-1}) = \det(A) \cdot \det(I + A^{-1} uv^T)$ e do fato que A é não singular (hipótese), $A + uv^T$ é não singular se e somente se $\det(I + A^{-1} uv^T) \neq 0$. Pelo Lema 1, $\det(I + A^{-1} uv^T) = 1 + v^T A^{-1} u = \sigma$. Com efeito, para verificar (13), precisamos somente mostrar que:

$$I = (A + uv^T) \left(A^{-1} - \frac{1}{\sigma} A^{-1} uv^T A^{-1} \right).$$

Por hipótese, temos que:

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

De forma que $v^T A^{-1} u$ é um escalar. Segue imediato que

$$\begin{aligned} &= I - \frac{1}{\sigma} [(1 + v^T A^{-1} u) uv^T A^{-1}] + uv^T A^{-1} + u(v^T A^{-1} u) v^T A^{-1} \\ &= I - \frac{1}{\sigma} [-uv^T A^{-1} - v^T A^{-1} u (uv^T A^{-1}) + uv^T A^{-1} + u(v^T A^{-1} u) v^T A^{-1}] \\ &= I - \frac{1}{\sigma} [v^T A^{-1} u (uv^T A^{-1}) + u(v^T A^{-1} u) v^T A^{-1}] = I. \end{aligned}$$

Ou seja,

$$(A + uv^T) \left(A^{-1} - \frac{1}{\sigma} A^{-1} uv^T A^{-1} \right) = I.$$

Agora, considere os procedimentos de números (9) - (10), alinhados à luz do seguinte lema pág 145, “James M. Ortega, Numerical Analysis: A Second Course, Classics in Applied Mathematics, SIAM, 1987”. Tem na Bibimecc.

□

Lema 3. *Ostrowski:* Suponha que $G : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tem um ponto fixo x^* no interior de D e que G tem uma derivada de Fréchet G' em x^* . Então, se o raio espectral de $G'(x^*)$ satisfaz

$$\ell(G'(x^*)) = \alpha < 1.$$

Então segue que x^* é um ponto de atração (fixo) da função de iteração

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

definição Um mapeamento $F : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é Fréchet-diferenciável, ou F-diferenciável, em um ponto interior x de D se existe um mapeamento linear $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que para qualquer $h \in \mathbb{R}^n$,

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\|h\|} \|F(x+h) - F(x) - Ah\| = 0,$$

onde $\|\cdot\|$ é uma norma vetorial em \mathbb{R}^n (a derivada de Fréchet é a derivada definida sobre espaços de Banach (=espaço vetorial normado completo), ver, e.g., Walter Rudin, Functional Analysis, McGraw, 1973).

OBS: A é uma matriz $n \times n$ que depende do ponto x , i.e., $A = A(x)$.

definição Um mapeamento linear A para o qual vale (i) é chamado “Derivada de Fréchet” de F em x , e é denotado por $F'(x)$.

Agora suponha que

$$F(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))^T.$$

onde $f_1(x)$ tem primeiras derivadas parciais contínuas em D . Seja $(F'(x))_{ij} = a_{ij}$, onde a_{ij} -ésimo elemento de A . Uma vez que convergência em normas implica em convergência pontual de cada componente, (i) com $h = t\ell_j$, onde $\ell_j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ e o j -ésimo vetor unitário, resulta

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} |f_i(x + t\ell_j) - f_i(x) - ta_{ij}(x)| = 0, \text{ para } 1 \leq i \leq n$$

entretanto,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (f_i(x + t\ell_j) - f_i(x)) = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \quad (\text{avaliada em } x)$$

por esta razão (ii) implica que $(F'(x))_{ij} = a_{ij}(x) = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n$. Desta maneira

$$F'(x) = \begin{bmatrix} \frac{df_1(x)}{dx_1} & \frac{df_1(x)}{dx_2} & \dots & \frac{df_1(x)}{dx_n} \\ \frac{df_2(x)}{dx_1} & \frac{df_2(x)}{dx_2} & \dots & \frac{df_2(x)}{dx_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{df_n(x)}{dx_1} & \frac{df_n(x)}{dx_2} & \dots & \frac{df_n(x)}{dx_n} \end{bmatrix}$$

Definição: A matriz de derivadas parciais acima é chamada de matriz jacobiana para a função $F(x)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in D \subset \mathbb{R}^n$

Com efeito, temos

$$B_{k+1} = B_k + \frac{[y^{(k)} - B_k s^{(k)T}]}{s^{(k)T} s^{(k)}}$$

Que tem a forma

$$B_{k+1} = B_k + uv^T, \text{ onde } u = \frac{y^{(k)} - B_k s^{(k)}}{s^{(k)T} s^{(k)}} \text{ e } v^T = s^{(k)T}$$

Desta maneira, pelo Lema 2 (Fórmula de Sherman-Morrison) fica:

$$B_{k+1}^{-1} = (B_k + uv^T)^{-1} = B_k^{-1} - \frac{1}{\sigma} B_k^{-1} uv^T B_k^{-1}$$

onde $\sigma = 1 + v^T B_k^{-1} u$.

Desta maneira,

$$(B_{k+1})^{-1} = B_K^{-1} - \frac{\frac{1}{s^{(k)T} s^{(k)}} [B_K^{-1} y^{(k)} - s^{(k)}] s^{(k)T} B_K^{-1}}{1 + s^{(k)T} \left[\frac{B_K^{-1} y^{(k)} - s^{(k)}}{s^{(k)T} s^{(k)}} \right]}$$

Por esta razão,

$$(B_{k+1}^{-1}) = B_{k+1}^{-1} + \frac{[s^{(k)} - B_K^{-1} y^{(k)}] s^{(k)T} B_K^{-1}}{s^{(k)T} B_K^{-1} y^{(k)}}$$

Tomando $H_k = B_K^{-1}$ e $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$, temos

$$H_{k+1} = H_k + \frac{[s^{(k)} - H_K y^{(k)}] s^{(k)T} H_K}{s^{(k)T} H_K y^{(k)}} \quad (14)$$

Portanto, o método de Broyden pode ser implementado da seguinte maneira

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H_k F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

$$y^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)}), \quad s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \quad (16)$$

$$H_{k+1} = H_k + \frac{[s^k - H_k y^k] s^{(k)T} H_k}{s^{(k)T} H_k y^{(k)}} \quad (17)$$

Aqui, $x^{(0)}$ é uma aproximação inicial e $H_0 = (F'(x^{(0)}))^{-1}$ ou uma boa aproximação para $(F'(x^{(0)}))^{-1}$.

Importante: O algoritmo de Broyden dado por (15)-(17) requer somente n avaliações de funções escalares, i.e, $F(x^{(k)})$, e $O(n^2)$ operações aritméticas por iteração,

i.e, as multiplicações matriz-vetor envolvendo H_k .

Observação: Um problema com o método de broyden é que B_{k+1} pode ser singular para algum k . Em tais casos temos que $s^{(k)T} H_k y^{(k)} = 0$ em (17). Ver o denominador. Assim, o método de Broyden é então implementado de forma dependente como posto em (6), ou seja, na forma:

$$B^+ = B + \theta \frac{(y - Bs)s^T}{s^T s} \quad (18)$$

Onde θ é escolhido para evitar/previnir que B^+ em (18) fique singular. Note que $\theta = 1$ em (18) recupera (6). Assim, para prevenir uma matriz singular B^+ , é melhor entender o significado na equação (18), escrevemos:

$$\det(B^+) = \det(B) \times \left[(1 - \theta) + \theta \frac{s^T B^{-1} y}{s^T s} \right] \quad (19)$$

uma vez que

$$B^+ = B \left[I + \theta \frac{[B^{-1}y - s]s^T}{s^T s} \right]$$

Agora, θ é escolhido de tal forma que seja o quanto mais próximo de 1 quanto possível (ver(19)) e sujeito a $|\det(B^+)| > \sigma |\det(B)|$ para algum $\sigma \in (0, 1)$.

Para finalizar temos ainda o seguinte resultado da convergência para o método de Broyden (ver prova em J.E. Dennis, on the convergence of Broyden's method for nonlinear systems of equations, mathematics of computation, vol25(115), pp. 559-567, 1971.)

Teorema 3. *Seja F continuamente diferenciável em um conjunto convexo aberto $D \subset \mathbb{R}^n$. Seja então um $x^* \in D$ tal que $F(x^*) = 0$, e $F'(x^*)$ tal que seja não singular. Além disso, suponha que exista uma constante \hat{c} tal que:*

$$\|F'(x) - F'(x^*)\| \leq \hat{c} \|x - x^*\|$$

para $x \in D$.

Então, o método de Broyden é localmente e superlinearmente convergente para x^ .*

Observação 1: O teorema anterior estabeleca que:

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|} \leq \alpha_k$$

ou então

$$\frac{\|e^{(k+1)}\|}{\|e^{(k)}\|} \leq \alpha_k$$

onde $\alpha_k \rightarrow 0$ quando $k \rightarrow \infty$. Com efeito, sob as mesmas hipóteses, o método de Newton é quadraticamente convergente, i.e,

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^2} \leq c$$

ou

$$\frac{\|e^{(k+1)}\|}{\|e^{(k)}\|^2} \leq c$$

para k suficientemente grande.

Observação 2: Embora $x^{(k)} \rightarrow x^*$ superlinearmente para o método de Broyden, não é necessariamente verdadeiro que $B_k \rightarrow F'(x^*)$ quando $k \rightarrow \infty$. De fato, o método de Broyden (por construção) também não é auto-corretivo face às aproximações, i.e, B_k pode conter um acúmulo de informações com erros de aproximação em B_j , $j < k$, sendo k o nível de iteração onde se observa a convergência superlinear (ver, por exemplo C.T. Kelley (1995)).

2. Subespaços de Krylov

Vimos que sob certas hipóteses, métodos de Newton para a aproximação/resolução numérica de sistemas não lineares,

$$F(x) = 0, \quad F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

podem ser escritos na forma geral,

$$p^{(k)} = -H^{(k)}F(x^{(k)}),$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}t^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

onde $H^{(k)}$ é uma matriz $n \times n$ e $t^{(k)}$ é um escalar. Com efeito, para identificar o Método de Newton clássico basta tomar,

$$H^{(k)} = (F'(x^{(k)}))^{-1} \quad \text{e} \quad t^{(k)} = 1.$$

Vimos também que um critério de parada robusto para avaliar a qualidade das aproximações pode ser dado por, (ver C. T. Kelley)

$$\|F(x_k)\| < \tau_r \|F(x_0)\| + \tau_a,$$

x_k é a aproximação atual, x_0 a aproximação inicial, τ_r é o erro relativo e τ_a o erro absoluto, onde,

$$\tau_a = \|x - x^*\|, \quad \text{leia-se} \quad \tau_a = \|x_{k-1} - x_k\| \quad \text{e,}$$

$$\tau_r = \frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|}, \quad \text{leia-se} \quad \tau_r = \frac{\|x_{k-1} - x_k\|}{\|x_k\|},$$

onde x^* é a solução exata (tipicamente não disponível).

Com efeito, métodos de Newton são nomeados basicamente a partir da estratégia que é empregada para a resolução do sistema linear em cada passo do Método de Newton, tal como no Método de Broyden. Cumpre reiterar que o Método de Broyden, apesar de ser interessante pela redução significativa do número de operações, tal método não é autocorretivo (= possibilidade de acúmulo de erros numéricos) face as aproximações subjacentes. Em outras palavras, quando o sistema,

$$F(x) = 0,$$

é "fortemente" acoplado e não linear, pode ser muito adequado usar uma variante do Método de Newton que seja autocorretivo e que também seja preciso resolver o sistema linear associado de modo a melhor preservar o acoplamento e não linearidades do sistema original $F(x) = 0$. Um método representativo da classe é o Método de Newton-Krylov, que veremos a seguir. De fato, dados $x^{(0)}$ e $F'(x^{(0)})$, $k = 0, 1, 2, \dots$

Execute a sequência,

1. $F'(x^{(k)})s^{(k)} = -F(x^{(k)}), \quad s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}.$
2. $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}.$
3. Teste qualidade das aproximações calculadas.

Assim, o Método de Newton-Krylov é dado pelo fato de que iremos utilizar subespaços de Krylov para a resolução numérica do sistema linear das equações de Newton em cada iteração, a saber,

$$\underbrace{F'(x^{(k)})}_A \underbrace{s^{(k)}}_x = \underbrace{-F(x^{(k)})}_b$$

OBS: Os métodos "de descida mais ingreme-ou máxima descida- e o gradientes conjugados são das classes "métodos de projeção" e "métodos de Krylov", respectivamente.

Subespaços de Krylov

Se a matriz A ($Ax = b$) dos coeficientes (a_{ij}) é grande, esparsa e definida-positiva, o método de escolha é normalmente o Método dos Gradientes Conjugados (tipicamente em conjunto com uma estratégia de pré-condicionamento). No entanto, em aplicações, é muitas vezes comum o caso onde a matriz dos coeficientes é simétrica mas não definida-positiva ou pode mesmo não ser simétrica.

Há outros métodos iterativos mais sofisticados para estes problemas, a maioria dos quais são baseados no conceito de um subespaço de Krylov. Um método baseado no subespaço de Krylov não "acessa" os elementos da matriz diretamente, mas sim realiza sistematicamente a operação multiplicação matriz-vetor para obter vetores que são projeções em um subespaço de Krylov de dimensão "mais baixa" onde um problema correspondente (e aproximado) é resolvido.

A solução obtida é, então, convertida para uma solução (= aproximada) do problema original $Ax = b$. Tais métodos podem de fato dar um bom resultado depois de um número relativamente pequeno de iterações.

Definição 1. *Suponha $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $u \in \mathbb{R}^n$ e k é um inteiro. A sequência de Krylov é o conjunto de vetores*

$$u, Au, A^2u, \dots, A^{k-1}u,$$

e o subespaço de Krylov $\mathcal{K}_n(A, u)$ gerado por A e u , e

$$\text{span}\{u, Au, A^2u, \dots, A^{k-1}u\}.$$

Tal espaço e de dimensão k se os vetores são linearmente independentes.

O Método dos Gradientes Conjugados e também um método na classe de métodos de subespaço de Krylov. Embora o M.G.C. possa também ser contruido via uma abordagem de otimização. O teorema que segue estabelece tal conexão, mas primeiro vamos relembrar o algoritmo G.C.:

```

Dados de entrada ( $A, b, x_1, \text{tol}, \text{numIter}$ )
begin function
 $r_0 = b - Ax_1$ 
 $p_0 = r_0$ 
  for  $i = 1:\text{numiter}$  do
     $\alpha_{i-1} = (r_{i-1}^T r_{i-1}) / (p_{i-1}^T A p_{i-1})$ 
     $x_i = x_{i-1} + \alpha_{i-1} p_{i-1}$ 
     $r_i = r_{i-1} - \alpha_{i-1} A p_{i-1}$ 
    if  $\|r_i\|_2 < \text{tol}$  then
      iter = i
      return  $[x_i, \text{iter}]$ 
    end if
  iter = -1
  return  $[x_{\text{numiter}}, \text{iter}]$ 
end function

```

Teorema 4. *Suponha que A é não singular. Segue então que com uma aproximação inicial $x_0 = 0$, depois de i iterações o método G.C. produz*

$$\begin{aligned} \text{span}\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_i\} &= \text{span}\{p_0, p_1, p_2, \dots, p_i\} = \text{span}\{r_0, r_1, r_2, \dots, r_i\} = \\ &= \mathcal{K}_i(A, p_0) = \text{span}\{p_0, Ap_0, A^2 p_0, \dots, A^{i-1} p_0\} = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \dots, A^{i-1} r_0\}. \end{aligned}$$

Demonstração. Seja

$$S_i = \text{span}\{p_0, p_1, p_2, \dots, p_{i-1}\}. \quad (i \text{ elementos})$$

Agora, $x_i = x_{i-1} + \alpha_{i-1} p_{i-1}$,

$$x_1 = 0 + \alpha_0 p_0,$$

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 p_1 = \alpha_0 p_0 + \alpha_1 p_1.$$

Em geral temos que,

$$x_i = \sum_{k=0}^{i-1} \alpha_k p_k,$$

e também

$$\text{span}\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_i\} = S_i. \quad (i \text{ elementos})$$

Por outro lado, do método contrutivo G.C. temos:

$$p_0 = r_0 \quad \text{e} \quad p_i = r_i + \beta_i p_{i-1}.$$

Uma vez que r_i e r_{i-1} estão em S_i , também vale:

$$Ap_{i-1} \in S_i.$$

Como um resultado,

$$\begin{aligned} S_i &= \mathcal{K}_i(A, p_0) = \text{span}\{p_0, p_1, p_2, \dots, A^{i-1}p_0\} \quad (i \text{ elementos}) \\ &= \mathcal{K}_i(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{i-1}r_0\}. \end{aligned}$$

Os p_i são A -ortogonais, os r_i são ortogonais, e então ambas as sequências são linearmente independentes. De fato, uma vez que A é não singular (por hipótese).

Os vetores em $\mathcal{K}_i(A, p_0)$ e $\mathcal{K}_i(A, r_0)$ são linearmente independentes, que é o resultado desejado. \square

OBS: Métodos de subespaço de Krylov são também úteis para o cálculo de autovalores, como a tabela a seguir (nomenclatura/sigla em inglês - original).

Tipo de matriz	Método Krylov $Ax = b$	Método Krylov $Ax = \lambda x$
$A = SPD$	CG CGNR	LANCZOS
$A \neq SPD$	CMRES BICG Bi-CGSTAB MINRES SYMMLQ CGS QMR	Bi-LANCZOS ARNOLDI