



PROGRAD
Pró-Reitoria de
Graduação



Notas de estudo

Método dos Gradientes Conjugados

Giselle Lopes da Cruz

Vitória da Conquista, 2024

Conteúdo

1	Objetivo	2
2	Introdução	2
3	Os métodos e seus algoritmos	3
4	Resultados de convergência	11
5	Resultados Numéricos	19

1 Objetivo

O artigo tem como objetivo apresentar uma família dos Métodos dos Gradientes Conjugado de Perry para resolver sistemas de equações não lineares monótonas em grande escala.

2 Introdução

Os sistemas de equações não lineares formam uma família de problemas intimamente relacionados aos problemas de otimização e frequentemente surgem nas áreas de ciência, tecnologia e indústria.

Um sistema de equações não lineares é dado por

$$F(x) = 0 \text{ sujeito a } x \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

onde $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, mapeamento continuamente diferenciável na vizinhança de \mathbb{R}^n . Além do mais, F é monótona, ou seja, ira satisfaz

$$(F(x) - F(y))^\top (x - y) \geq 0, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n \quad (2)$$

Temos que os Métodos dos Gradientes Conjugados(CG) formam uma importante classe de algoritmos usados em resolver problemas de otimização irrestrita em grande escala. Tem como objetivo resolver de minimização dado da seguinte forma,

$$\min\{f(x)|x \in \mathbb{R}^n\} \quad (3)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sendo continuamente diferenciável e limitada inferiormente. O método gera uma sequência x_k a partir do ponto inicial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ utilizando a seguinte forma iterativa

$$x_{k+1} = x_k + s_k, \quad s_k = \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

com x_k sendo a iterada atual, α_k o parâmetro de comprimento de passo calculado por meio de alguma busca linear e d_k a direção de descida do CG definida da seguinte forma,

$$d_k = \begin{cases} -F_k & \text{se } k = 0, \\ -F_k + \beta_k d_{k-1} & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (5)$$

onde β_k é um escalar e $F_k = \nabla f(x_k)$. Uma das coisas mais importante do CG é a escalar β_k

Ao empregar o aspecto quase-Newton, Dai e Liao (DL) propôs o seguinte β_k da seguinte

maneira,

$$\beta_k^{DL} = \frac{(y_{k-1} - ts_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top y_{k-1}}, \quad t \geq 0, \quad (6)$$

com $y_{k-1} = F_k - F_{k-1}$, $s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$.

Os resultados numéricos mostraram que o método DL é eficaz, no entanto as direções geradas pelo esquema podem não garantir descida suficiente. Ou seja, o método pode não satisfazer a condição de descida suficiente como segue:

$$F_k^\top d_k \leq -\lambda \|F_k\|^2. \quad \forall k. \quad (7)$$

Nesse artigo, com base em um método de Perry estendido e na técnica de projeção de hiperplano, propomos um método de projeção de Perry CG para sistemas de equações monótonas não lineares.

3 Os métodos e seus algoritmos

Vamos mostrar o método de projeção no hiperplano. Tal técnica gera uma sequência $\{z_k\}$ tal que $z_k = x_k + \alpha_k d_k$, com $\alpha_k > 0$. Com isso teremos que

$$F(z_k)^\top (x_k - z_k) > 0. \quad \text{consequência de (7)} \quad (8)$$

Ademais, com a monotonicidade de F , teremos

$$F(z_k)^\top (x^* - z_k) = (F(z_k) - F(x^*))^\top (x^* - z_k) \leq 0 \quad (9)$$

para cada solução x^* do sistema (1). Assim, de (8) e (9) o hiperplano é definido da seguinte forma

$$H_k = \{x \in \mathbb{R}^n \mid F(z_k)^\top (x - z_k) = 0\}, \quad (10)$$

separa estritamente a iterada atual x_k da solução x^* . Solodov e Svaiter usaram esse fato para sugerir a próxima iteração como a projeção x_k no hiperplano H_k . Assim x_{k+1} será calculada da seguinte forma

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^\top (x_k - z_k)}{\|F_k\|^2} \cdot F(z_k) \quad (11)$$

Temos que $\|\cdot\|^2$ representa a norma euclidiana, $F_k = F(x_k)$, $F_{K-1} = F(x_{k-1})$ e f em (3) é especificada pela seguinte forma, conhecida como função mérito

$$f(x) := \frac{1}{2} \|F_k\|^2. \quad (12)$$

Além do mais, iremos assumir que a função F é uniformemente monótona, ou seja,

$$(F(x) - F(y))^\top (x - y) \geq m \|x - y\|^2, \quad m \text{ é uma constante positiva.} \quad (13)$$

A seguir, lembraremos que para métodos quase-Newton é uma matriz simétrica definida positiva B_{k-1} que aproxima da hessiana $\nabla^2 f(x_{k-1})$ e é atualizada pela matriz B_k de tal modo que,

$$B_k s_{k-1} = y_{k-1}, \quad (14)$$

tal condição é conhecida como secante. Zhang et al e Zhang e Xu expandiu (14) e deu a seguinte extensão como segue:

$$B_k s_{k-1} = \bar{z}_{k-1}, \quad (15)$$

com

$$\begin{cases} \bar{z}_{k-1} = y_{k-1} + \left(\frac{\theta_{k-1}}{s_{k-1}^\top \mu_{k-1}}\right) \mu_{k-1} & , \\ \theta_{k-1} = 6(f_{k-1} - f_k) + 3s_{k-1}^\top (F_{k-1} + F_k) & , \end{cases} \quad (16)$$

onde $\mu_{k-1} \in \mathbb{R}^n$ é um parâmetro vetorial tal que $s_{k-1}^\top \mu_{k-1} \neq 0$.

Da mesma forma, Wei et. al deram a seguinte extensão da secante padrão:

$$B_k s_{k-1} = \bar{y}_{k-1} \quad (17)$$

com

$$\begin{cases} \bar{y}_{k-1} = y_{k-1} + \left(\frac{\varsigma_{k-1}}{s_{k-1}^\top \mu_{k-1}}\right) \mu_{k-1} & , \\ \varsigma_{k-1} = 2(f_{k-1} - f_k) + s_{k-1}^\top (F_{k-1} + F_k) & , \end{cases} \quad (18)$$

onde $\mu_{k-1} \in \mathbb{R}^n$ é um parâmetro vetorial tal que $s_{k-1}^\top \mu_{k-1} \neq 0$. Aqui, a fim de explorar a vantagem teórica das equações secantes modificadas acima, empregamos a seguinte extensão:

$$B_k s_{k-1} = u_{k-1} = y_{k-1} + \xi \frac{\varsigma_{k-1}}{s_{k-1}^\top \mu_{k-1}} \mu_{k-1} \quad (19)$$

onde $\xi \in [0, 3]$, ς_{k-1} definido em (18) e $s_{k-1}^\top \mu_{k-1} \neq 0$. Se $\xi = 0$, (19) se reduz a (14) e se $\xi = 1$, (19) se reduz a (17). Além de disso, se $\xi = 3$, teremos que (19) se reduz a (15).

Recentemente, na tentativa de encontrar aproximações adequadas para o parâmetro DL t em (6), Babaie -Kafaki e Ghanbari propuseram uma família de escolhas adaptativas de dois parâmetros para t , que garante a propriedade de descida, com base em um autovalor da matriz de direção de busca do método DL. Eles propuseram a seguinte extensão do parâmetro

de atualização do PRP:

$$\beta_k^{EPRP} = \beta_k^{PRP} - t \frac{F_k^\top d_{k-1}}{\|F_{k-1}\|^2} \quad (20)$$

onde β_k^{PRP} é o parâmetro PRP não m

$$\bar{\beta}_k^{EP} = \beta_k^P - t \frac{F_k^\top s_{k-1}}{d_{k-1}^\top y_{k-1}}, \quad (21)$$

odificado. Motivados por (20), sugerimos a seguinte extensão do parâmetro de atualização de Perry: com t um parâmetro não negativo e β_k^P é o parâmetro de atualização de Perry não modificado dado pelo seguinte:

$$\beta_k^P = \frac{(y_{k-1} - s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top u_{k-1}} F_k. \quad (22)$$

Substituindo y_{k-1} em (21) por u_{k-1} , obtemos o seguinte :

$$\hat{\beta}_k^{EP} = \frac{(u_{k-1} - s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top u_{k-1}} - t \frac{s_{k-1}^\top F_k}{d_{k-1}^\top u_{k-1}}. \quad (23)$$

No entanto, β_k^{EP} não está definido, uma vez que $d_{k-1}^\top u_{k-1}$ pode ser 0 devido a definição de u_{k-1} em (19). Portanto, redefinimos u_{k-1} e obtemos sua forma revisada da seguinte forma:

$$w_{k-1} = y_{k-1} + \xi \frac{\max\{\zeta_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top \mu_{k-1}} \mu_{k-1} \quad (24)$$

Fazendo algumas manipulações , podemos reescrever (23) da seguinte maneira:

$$\bar{\beta}_k^{EP} = \frac{(w_{k-1} - (1+t)s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \quad (25)$$

Definido $t' := 1 + t$, e substituindo y_{k-1} por w_{k-1} , obtemos uma modificação do método DL original, ou seja

$$\beta_k = \frac{(w_{k-1} - t' s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}}. \quad (26)$$

A seguir, procedemos à obtenção de valores adequados para o parâmetro t' em (26) e, conseqüentemente, desenvolvemos um método Perry CG para resolver (1). Ao empregar a ideia apresentada em [8], investigamos a propriedade de descida do método proposto.

Seguindo a abordagem de Perry, à direção de descida do método DL em (26) pode ser escrito da seguinte forma,

$$d_k = -H_k F_k \quad (27)$$

onde H_k é chamada de matriz de direção de busca e é dada da seguinte forma

$$H_k = I - \frac{s_{k-1}w_{k-1}^\top}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} + t' \frac{s_{k-1}s_{k-1}^\top}{s_{k-1}^\top w_{k-1}}. \quad (28)$$

Sabemos que H_k não simétrica e nem definida positiva. A partir de (27) e aplicando a abordagem em [5], podemos escrever o seguinte:

$$d_k^\top F_k = -F_k^\top H_k^\top F_k = -F_k^\top \overline{H}_k F_k. \quad (29)$$

com

$$\overline{H}_k = \frac{H_k^\top + H_k}{2} = I - \frac{1}{2} \frac{s_{k-1}w_{k-1}^\top}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - \frac{1}{2} \frac{w_{k-1}s_{k-1}^\top}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} + t' \frac{s_{k-1}s_{k-1}^\top}{s_{k-1}^\top w_{k-1}}. \quad (30)$$

Portanto, a matriz \overline{H}_k definida por (30) é uma matriz simétrica. E assim, para analisar a propriedade de descida do método proposto, precisamos encontrar os autovalores de \overline{H}_k e sua estrutura usando o seguinte teorema.

Teorema 3.1. *Seja a matriz \overline{H}_k definida por (30). Então seus autorvalores consistem em 1 com (multiplicidade $n - 2$), λ_k^+ e λ_k^- , onde*

$$\lambda_k^+ = \frac{1}{2}[(1 + a_k) + \sqrt{(a_k - 1)^2 + b_k - 1}] \quad (31)$$

$$\lambda_k^- = \frac{1}{2}[(1 + a_k) - \sqrt{(a_k - 1)^2 + b_k - 1}] \quad (32)$$

com

$$a_k = t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \quad (33)$$

$$b_k = \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} \quad (34)$$

Ademais, λ_k^+ e λ_k^- são autovalores reais positivos.

Demonstração. Como F é uniformemente contínua, então $(F(x) - F(y))^\top(x - y) \geq m \|x - y\|^2$, m uma constante positiva. Suponha que V seja um espaço vetorial gerado por $\{s_{k-1}, w_{k-1}\}$, então $\dim(V) \leq 2$ e $\dim(V^\perp) \geq n - 2$. Portanto, existe um conjunto de vetores mutuamente ortogonais $\{\varphi_{k-1}^i\}_{i=1}^{n-2} \subset V^\perp$ satisfazendo o seguinte

$$s_{k-1}^\top \varphi_{k-1}^i = w_{k-1}^\top \varphi_{k-1}^i = 0, \quad (35)$$

o que de (30) leva o seguinte,

$$\overline{H}_k \varphi_{k-1}^i = \overline{H}_k^\top \varphi_{k-1}^i = \varphi_{k-1}^i, \quad i = 1, \dots, n-2. \quad (36)$$

Então, φ_{k-1}^i , para $i = 1, \dots, n-2$ são autovetores de \overline{H}_k com autovalor 1 cada. Seja λ_k^+ e λ_k^- os dois autovalores restantes, respectivamente. Desde que a soma dos autovalores de uma matriz quadrada simétrica iguais ao seu traço, temos o seguinte:

$$\text{trace}(\overline{H}_k) = n-1 + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} = \underbrace{1 + \dots + 1}_{(n-2) \text{ vezes}} + \lambda_k^+ + \lambda_k^- \quad (37)$$

para o qual temos o seguinte:

$$\lambda_k^+ + \lambda_k^- = 1 + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \quad (38)$$

Além disso, aplicando as propriedades da norma de Frobenius, temos o seguinte:

$$\begin{aligned} \|\overline{H}_k\|_F^2 &= \text{trace}(\overline{H}_k H_k) = \text{trace}(\overline{H}_k^2) \\ &= n - \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} + t'^2 \frac{\|s_{k-1}\|^4}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} = \underbrace{1 + \dots + 1}_{(n-2) \text{ vezes}} + \lambda_k^{+2} + \lambda_k^{-2} \end{aligned} \quad (39)$$

para o qual obtemos

$$\lambda_k^{+2} + \lambda_k^{-2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} + t'^2 \frac{\|s_{k-1}\|^4}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} \quad (40)$$

Assim de (38) e (40) usando a identidade abaixo

$$(\lambda_k^+ + \lambda_k^-)^2 = \lambda_k^{+2} + 2\lambda_k^+ \lambda_k^- + \lambda_k^{-2} \quad (41)$$

obteremos o seguinte,

$$\lambda_k^+ \lambda_k^- = \frac{1}{4} + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - \frac{1}{4} \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2}. \quad (42)$$

De (38) e (42) podemos obter λ_k^+ e λ_k^- como raízes do seguinte polinômio quadrático como segue

$$\lambda^2 - \left(1 + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}}\right) \lambda + \frac{1}{4} + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - \frac{1}{4} \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} = 0 \quad (43)$$

E aplicando a fórmula quadrática com alguns rearranjos obtemos o seguinte,

$$\lambda_k^\pm = \frac{1}{2} \left[\left(1 + t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right) \pm \sqrt{\left(t' \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - 1 \right)^2 + \frac{\|s_{k-1}\|^2 \|w_{k-1}\|^2}{(s_{k-1}^\top w_{k-1})^2} - 1} \right] \quad (44)$$

Podemos escrever (44) da seguinte forma,

$$\lambda_k^\pm = \frac{1}{2} \left[(1 + a_k) \pm \sqrt{(a_k - 1)^2 + b_k - 1} \right] \quad (45)$$

o que prova (31) e (32). Agora devemos mostrar que

$$\frac{1}{2} \left[(1 + a_k) \pm \sqrt{(a_k - 1)^2 + b_k - 1} \right] > 0 \quad (46)$$

Claramente de (44), usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz $\lambda_k^+ > 0$. E depois de algumas manipulações algébricas pode-se ver que λ_k^- para

$$t' > \frac{1}{4} \left(\frac{\|w_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - \frac{s_{k-1}^\top w_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \right) \quad (47)$$

Agora vou mostrar que $\lambda_k^- > 0$. Para uma melhor visualização teremos que $s_{k-1} = s$, $w_{k-1} = w$, $t' = t$. Temos que com $s^\top w > 0$

$$\lambda_k^- = \frac{1}{2} \left[\left(1 + t' \frac{\|s\|^2}{s^\top w} \right) - \sqrt{\left(t' \frac{\|s\|^2}{s^\top w} - 1 \right)^2 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1} \right]. \quad (48)$$

Seja,

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left[\left(1 + t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} \right) - \sqrt{\left(t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} - 1 \right)^2 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1} \right] > 0 \\
& \Rightarrow \left(1 + t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} \right) - \sqrt{\left(t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} - 1 \right)^2 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1} > 0 \\
& \Rightarrow \left(1 + t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} \right) > \sqrt{\left(t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} - 1 \right)^2 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1} \\
& \Rightarrow \left(1 + t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} \right)^2 > \left(t \frac{\|s\|^2}{s^\top w} - 1 \right)^2 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1 \\
& \Rightarrow 1 + \frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} + \frac{t^2 \|s\|^4}{(s^\top w)^2} > \frac{t^2 \|s\|^4}{(s^\top w)^2} - \frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} + 1 + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1 \\
& \Rightarrow 1 + \frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} > -\frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} + \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} \\
& \Rightarrow 1 + \frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} + \frac{2t \|s\|^2}{s^\top w} > \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} \\
& \Rightarrow \frac{4t \|s\|^2}{s^\top w} > \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - 1 \\
& \Rightarrow 4t \|s\|^2 > (s^\top w) \frac{\|s\|^2 \|w\|^2}{(s^\top w)^2} - (s^\top w) \\
& \Rightarrow t > \frac{1}{4} \left(\frac{\|w\|^2}{s^\top w} - \frac{s^\top w}{\|s\|^2} \right).
\end{aligned}$$

Portanto, todos os autovalores da matriz simétrica \overline{H}_k são números reais positivos, o que garante que seja uma matriz positiva-definida. Consequentemente, de (29) temos o seguinte

$$d_k^\top \overline{H}_k = -F_k^\top \overline{H}_k F_k \leq -\lambda_k^- \|F_k\|^2 < 0 \quad (49)$$

o que mostra que a condição de descida está satisfeita. Portanto, com base em nossa análise de autovalores, sugerimos as seguintes escolhas de dois parâmetros para t' no método proposto

$$t'_{k1} = m^* \frac{\|w_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - n^* \frac{s_{k-1}^\top w_{k-1}}{\|w_{k-1}\|^2} \quad (50)$$

□

Observação 3.1. Como o parâmetro t é não negativo, restringiremos os valores do parâmetro n^* em (49) a serem negativos de modo a evitar uma aproximação numericamente irracional [26]. Portanto, com base na observação acima podemos escrever nosso parâmetro de atualização modificada com

$$\beta_k^1 = \frac{(w_{k-1} - t'_{k1}s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \quad (51)$$

com $m^* \geq \frac{1}{4}$ e $n^* \leq 0$ satisfazendo (49) e garantindo a condição de descida.

Também escrevemos a direção de descida para o método proposto da seguinte forma,

$$d_k = -F_k + \left(\frac{(w_{k-1} - t'_{k1}s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \right) d_{k-1} \quad (52)$$

Agora listaremos as etapas do primeiro algoritmo como segue.

Algoritmo 1: MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS PERRY

- 1 Dados: $\sigma \in (0, 1), \beta \in (0, 1), \epsilon > 0$, e $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
- 2 Faça: $k := 0$.
- 3 Calcule $F(x_k)$. Se $\|F(x_k)\| \leq \epsilon$, pare, caso contrário vá para o passo 4.
- 4 Gere a direção de descida d_k usando (51). Pare se $d_k = 0$.
- 5 Determine o parâmetro de comprimento de passo $\alpha_k = \beta^{\bar{m}}$ com \bar{m} sendo o menor número inteiro não negativo tal que

$$-F(x_k + \beta^{\bar{m}k} d_k)^\top d_k \geq \sigma_k \beta^{\bar{m}k} \|d_k\|^2 \quad (53)$$

Defina $z_k = x_k + \alpha_k d_k$.

- 6 Se $\|F(z_k)\| = 0$, pare, caso contrário vá para o passo 7.
- 7 Calcule a projeção de x_k em H_k usando

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^\top (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k)$$

- 8 Defina $k := k + 1$ e vá para a etapa 1

Agora, mantendo $t' := 1 + t$ e substituindo w_{k-1} por y_{k-1} em (26), obtemos o método DL original em (6). Em seguida uma abordagem semelhante à realizada anteriormente, vamos ter uma segunda estimativa para t' :

$$t'_{k2} = q \frac{\|y_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top y_{k-1}} - r \frac{s_{k-1}^\top y_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2}, \quad (54)$$

onde $q > \frac{1}{4}$ e $r < \frac{1}{4}$. Consequentemente, damos o parâmetro de atualização correspondente

direção de descida da seguinte forma:

$$\beta_k^2 = \frac{(w_{k-1} - t'_{k2} s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \quad (55)$$

com $q \geq \frac{1}{4}$ e $r \leq 0$ satisfazendo (49) e garantindo a condição de descida.

$$d_k = -F_k + \left(\frac{(w_{k-1} - t'_{k2} s_{k-1})^\top F_k}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \right) d_{k-1}. \quad (56)$$

Agora, apresentaremos o segundo algoritmo da seguinte forma:

Algoritmo 2: MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS PERRY

- 1 Dados: $\sigma \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$, $\epsilon > 0$, e $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
- 2 Faça: $k := 0$.
- 3 Calcule $F(x_k)$. Se $\|F(x_k)\| \leq \epsilon$, pare, caso contrário vá para o passo 4.
- 4 Gere a direção de descida d_k usando (55). Pare se $d_k = 0$.
- 5 Determine o parâmetro de comprimento de passo $\alpha_k = \beta^{\bar{m}}$ com \bar{m} sendo o menor número inteiro não negativo tal que

$$-F(x_k + \beta^{\bar{m}k} d_k)^\top d_k \geq \sigma_k \beta^{\bar{m}} \|d_k\|^2 \quad (57)$$

Defina $z_k = x_k + \alpha_k d_k$.

- 6 Se $\|F(z_k)\| = 0$, pare, caso contrário vá para o passo 7.
- 7 Calcule a projeção de x_k em H_k usando

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^\top (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k)$$

- 8 Defina $k := k + 1$ e vá para a etapa 1
-

4 Resultados de convergência

Para discutir a convergência global do Algoritmo 1, exigiremos o seguinte:

1. O conjunto Φ definido por

$$\Phi = \{x \mid \|F(x)\| \leq \|F(x_0)\|\} \quad (58)$$

é limitado, ou seja, existe uma constante $B > 0$ tal que $\|F(x)\| \leq B$, $\forall x \in \Phi$.

2. O conjunto solução de F é não vazio, ou seja, existe uma solução $x^* \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz $F(x^*) = 0$.

3. A função F é Lipschitz contínua, ou seja, existe uma constante positiva L tal que

$$\|F(x) - F(y)\| \leq L \|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \quad (59)$$

As suposições 1 e 3 implicam (ver Proposição 1.3 de [74]) que existe uma constante positiva tal que

$$\|F(x_k)\| \leq \Psi. \quad (60)$$

Também usamos o seguinte Lema, que se originou do lema 2.1 no trabalho de Solodov e Svaiter [49], que também vale para o Algoritmo 1. Omitiremos a prova por ser semelhante à de [49].

Além disso, Temos que a função mérito é dada por $f(x) = 1/2 \|F(x)\|^2 = 1/2 F(x)^\top F(x)$. Sabe-se que $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $F(x) = (F_1(x_1), \dots, F_n(x_n))$. E $F_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, assim, $f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n F_i(x)^2$, teremos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_j} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^n F_i(x)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} (F_i(x)^2) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n 2F_i(x) \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \\ &= \sum_{i=1}^n F_i(x) \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \\ &= \sum_{i=1}^n F_i(x) \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \\ &= F_1(x) \frac{\partial F_1}{\partial x_j} + \dots + F_n(x) \frac{\partial F_n}{\partial x_j} \\ &= \langle F(x), \mathbf{J}_F(x) \rangle \\ &= \mathbf{J}_F(x)^\top F(x) \end{aligned}$$

Logo, $f'(x) = \mathbf{J}_F(x)^\top F(x)$.

Lema 4.1 (Solodov e Svaiter). *Suponha que F seja monótona e as suposições 2 e 3 sejam válidas. Deixe a sequência $\{x_k\}$ ser gerada pelo Algoritmo 1 com direção de descida d_k dada por (51). Então para qualquer x^* que satisfaça $F(x^*) = 0$, temos o seguinte:*

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \|x_{k+1} - x_k\|^2, \quad (61)$$

e a sequência $\{x_k\}$ é limitada. Além disso, ou a sequência $\{x_k\}$ é finita com a solução de (1) ser a última iteração ou $\{x_k\}$ é infinita e

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x_{k+1} - x_k\|^2 < \infty, \quad (62)$$

o que implica que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = 0. \quad (63)$$

Demonstração. Temos que

$$\begin{aligned} \|x_k - x^*\|^2 &= \|(x_k - x_{k+1}) + (x_{k+1} - x^*)\|^2 \\ &= \|x_k - x_{k+1}\|^2 + \|x_{k+1} - x^*\|^2 + 2\langle x_k - x_{k+1}, x_{k+1} - x^* \rangle \\ &\geq \|x_k - x_{k+1}\|^2 + \|x_{k+1} - x^*\|^2 \\ &= \left\| x_k - \left(x_k - \frac{F(z_k)^\top (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k) \right) \right\|^2 + \|x_{k+1} - x^*\|^2 \\ &= \left(\frac{F(z_k)^\top (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|} \right)^2 + \|x_{k+1} - x^*\|^2 \end{aligned}$$

Além disso, sabemos que $0 < \|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \|x_k - x_{k+1}\|^2$. Desta desigualdade resulta que a sequência $\{\|x_k - x^*\|\}$ é monótona decrescente e limitada, portanto convergente.

Também vale que

$$\|x_k - x_{k+1}\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \|x_{k+1} - x^*\|^2 \quad (64)$$

Passando limite quando $k \rightarrow +\infty$, obtemos que $\lim_{k \rightarrow +\infty} (x_k - x_{k+1}) = 0$. ■

□

Lema 4.2. *Suponha que F seja monótona e as suposições 2 e 3 sejam válidas. Deixe a sequência $\{x_k\}$ seja gerada pelo Algoritmo 1 com direção de descida dada por (51). Então a sequência $\{F_k\}$ é limitada, ou seja, existe uma constante $\varpi > 0$ tal que $\|F_k\| \leq \varpi$.*

Demonstração: Pelo lema anterior, obtemos,

$$\|x_k - x^*\|^2 \leq \|x_0 - x^*\|^2 \quad (65)$$

Como F é Lipschitz contínua então

$$\|F(x_k)\| = \|F(x_k) - F(x^*)\| \leq L \|x_k - x^*\| \leq L \|x_0 - x^*\|. \quad (66)$$

Assim, temos que $\varpi = L \|x_0 - x^*\|$.

Lema 4.3. *Seja a sequência $\{x_k\}$ gerada pelo Algoritmo 1, então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0. \quad (67)$$

Demonstração: Pelo lema 1 $\{\|x_k - x^*\|\}$ é monótona e converge, logo é limitada. Seja $z_k = x_k + \alpha_k d_k$ e a busca $-F(x_k + \beta^{\overline{m}_k} d_k)^\top d_k \geq \sigma_k \beta^{\overline{m}_k} \|d_k\|^2$, temos que,

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \frac{|F(z_k)^\top (x_k - z_k)|}{\|F(z_k)\|} \quad (68)$$

$$= \frac{|\alpha_k F(z_k)^\top d_k|}{\|F(z_k)\|} \quad (69)$$

$$\geq \frac{\sigma_k \alpha_k^2 \|F(z_k)\| \|d_k\|^2}{\|F(z_k)\|} \quad (70)$$

$$= \sigma_k \alpha_k^2 \|d_k\|^2 \quad (71)$$

$$\geq 0 \quad (72)$$

Pelo $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = 0$ e por (38)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0 \quad (73)$$

Lema 4.4. *Suponha que a suposição 3 seja válida e a sequência $\{x_k\}$ gerada pelo algoritmo 1 é limitada, então existe uma constante $\overline{M} > 0$ tal que*

$$\|d_k\| \leq \overline{M}, \quad \forall k. \quad (74)$$

Demonstração: Pelo fato da F ser uniformemente monótona, i.e.,

$$(F(x) - F(y))^\top (x - y) \geq m \|x - y\|^2 \quad (75)$$

e por

$$w_{k-1} = y_{k-1} + \xi \frac{\max\{\zeta_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1}. \quad (76)$$

Obtemos o seguinte:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow s_{k-1}^\top w_{k-1} &= s_{k-1}^\top \cdot \left(y_{k-1} + \xi \frac{\max\{\varsigma_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1} \right) \\
&= s_{k-1}^\top y_{k-1} + \xi \frac{\max\{\varsigma_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1}^\top s_{k-1} \\
&= y_{k-1}^\top s_{k-1} + \xi \max\{\varsigma_{k-1}, 0\} \\
&= (F(x_k) - F(x_{k-1}))^\top (x_k - x_{k-1}) + \xi \max\{\varsigma_{k-1}, 0\} \\
&\geq m \|x_k - x_{k-1}\|^2 + \xi \max\{\varsigma_{k-1}, 0\} \\
&= m \|s_{k-1}\|^2 + \xi \max\{\varsigma_{k-1}, 0\} = C
\end{aligned}$$

Temos que,

$$\varsigma_{k-1} = 2(f_{k-1} - f_k) + (F_{k-1} + F_k)^\top s_{k-1}$$

Aplicando o TVM em f , com $\zeta = \lambda x_{k-1} + (1 - \lambda)x_k$ para $\lambda \in (0, 1)$ e $\nabla f(x) = \mathbf{J}_F(x)^\top F(x)$.

$$\begin{aligned}
\varsigma_{k-1} &= 2(f_{k-1} - f_k) + (F_{k-1} + F_k)^\top s_{k-1} \\
&= (-2\nabla f(\zeta) + F_{k+1} + F_k)^\top s_{k-1} \\
&= (-2\mathbf{J}_F(\zeta)^\top F(\zeta) + F_{k-1} + F_k)^\top s_{k-1}
\end{aligned}$$

Tomando o módulo de ς , teremos,

$$\begin{aligned}
|\varsigma_{k-1}| &\leq \| -2\mathbf{J}_F(\zeta)^\top F(\zeta) + F_{k-1} + F_k \| \|s_{k-1}\| \\
&\leq (2\|\mathbf{J}_F(\zeta)^\top F(\zeta)\| + \|F_k\| + \|F_{k-1}\|) \|s_{k-1}\| \\
&\leq (2\|\mathbf{J}_F(\zeta)\| \|F(\zeta)\| + 2\Psi) \|s_{k-1}\| \\
&\leq (2\Psi \|\mathbf{J}_F(\zeta)\| + 2\Psi) \|s_{k-1}\| \\
&\leq (2\Psi\theta + 2\Psi) \|s_{k-1}\| \\
&= 2\Psi(\theta + 1) \|s_{k-1}\|
\end{aligned}$$

Utilizando a definição de w_{k-1} , o fato de F ser Lipschitz contínua e $|\varsigma_{k-1}| \leq 2\Psi(\theta + 1) \|s_{k-1}\|$,

obteremos o seguinte,

$$\begin{aligned}
\|w_{k-1}\| &= \left\| y_{k-1} + \xi \frac{\max\{\zeta_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1} \right\| \\
&\leq \|y_{k-1}\| + \left\| \xi \frac{\max\{\zeta_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1} \right\| \\
&= \|F(x_k) - F(x_{k-1})\| + \left\| \xi \frac{\max\{\zeta_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^\top s_{k-1}} s_{k-1} \right\| \\
&\leq L \|s_{k-1}\| + 2\xi\Psi(\theta + 1) \|s_{k-1}\| = \widehat{M}
\end{aligned}$$

Temos que,

$$\begin{aligned}
t'_{k1} &= m^* \frac{\|w_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - n^* \frac{s_{k-1}^\top w_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \\
\Rightarrow |t'_{k1}| &= \left| m^* \frac{\|w_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} - n^* \frac{s_{k-1}^\top w_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \right| \\
&\leq \left| m^* \frac{\|w_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right| + \left| n^* \frac{s_{k-1}^\top w_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \right| \\
&\leq m^* \frac{\widehat{M}^2}{C} + |n^*| \frac{C}{\|s_{k-1}\|^2}
\end{aligned}$$

Com tudo isso, teremos que

$$\begin{aligned}
\|d_k\| &= \|-F(x_k) + \beta_k d_{k-1}\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1} - t'_{k1} s_{k-1})^\top F(x_k)}{d_{k-1}^\top w_{k-1}} \right] d_{k-1} \right\|
\end{aligned}$$

Temos que $s_k = \alpha_k d_k \rightarrow d_{k-1} = \frac{s_{k-1}}{\alpha_{k-1}}$, com $\alpha_k > 0$. Assim,

$$\begin{aligned}
\|d_k\| &= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1} - t'_{k1} s_{k-1})^\top F(x_k)}{d_{k-1} w_{k-1}} \right] d_{k-1} \right\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1} - t'_{k1} s_{k-1})^\top F(x_k)}{(s_{k-1}/\alpha_{k-1})^\top w_{k-1}} \right] \frac{s_{k-1}}{\alpha_{k-1}} \right\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1} - t'_{k1} s_{k-1})^\top F(x_k)}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right] s_{k-1} \right\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1}^\top - t'_{k1} s_{k-1}^\top) F(x_k)}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right] s_{k-1} \right\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1}^\top F(x_k) - t'_{k1} s_{k-1}^\top F(x_k))}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right] s_{k-1} \right\| \\
&= \left\| -F(x_k) + \left[\frac{(w_{k-1}^\top F(x_k) s_{k-1} - t'_{k1} s_{k-1}^\top F(x_k) s_{k-1})}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \right] \right\| \\
&\leq \|F(x_k)\| + \frac{\|w_{k-1}\| \|F(x_k)\|}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \|s_{k-1}\| + t'_{k1} \frac{\|s_{k-1}\| \|F(x_k)\|}{s_{k-1}^\top w_{k-1}} \|s_{k-1}\| \\
&\leq \Psi + \frac{\Psi \widehat{M} \|s_{k-1}\|}{C} + \left(m^* \frac{\widehat{M}^2}{C} + |n^*| \frac{C}{\|s_{k-1}\|^2} \right) \frac{\Psi \|s_{k-1}\|^2}{C} \\
&= \Psi \left(1 + \frac{\widehat{M} \|s_{k-1}\|}{C} + \left(m^* \frac{\widehat{M}^2}{C} + |n^*| \frac{C}{\|s_{k-1}\|^2} \right) \frac{\|s_{k-1}\|^2}{C} \right)
\end{aligned}$$

Portanto, $\overline{M} := \Psi \left(1 + \frac{\widehat{M} \|s_{k-1}\|}{C} + \left(m^* \frac{\widehat{M}^2}{C} + |n^*| \frac{C}{\|s_{k-1}\|^2} \right) \frac{\|s_{k-1}\|^2}{C} \right)$. ■

Teorema 4.1. *Suponha que F seja monótona e as suposições 2 e 3 sejam válidas. Seja $\{x_k\}$ e $\{z_k\}$ sequências geradas pelo algoritmo 1. Então*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|F(x_k)\| = 0. \quad (77)$$

Demonstração: A prova será feita por contradição.

Suponha que $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|F(x_k)\| = 0$ não é verdadeira. Então existe $\eta > 0$ tal que $\|F(x_k)\| \geq \eta$, para todo $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Temos que $d_k^\top F_k \leq -\lambda \|F(x_k)\|^2$, com isso teremos que,

$$\lambda \|F(x_k)\|^2 \leq -F(x_k)^\top d_k \leq \|F(x_k)\| \|d_k\|, \quad \forall k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

Teremos,

$$\lambda \|F(x_k)\|^2 \leq \|F(x_k)\| \|d_k\| \Rightarrow \lambda \|F(x_k)\| \leq \|d_k\| \Rightarrow \|d_k\| \geq \lambda \eta > 0$$

Portanto, utilizando $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0$ e a desigualdade anterior, teremos,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0 \quad (78)$$

Pela busca linear $-F(x_k + \beta^{\bar{m}} d_k)^\top d_k \geq \sigma_k \beta^{\bar{m}} \|d_k\|^2$ e para k suficientemente grande, temos que $\sigma_k \beta^{\bar{m}_k - 1}$ não irá satisfazer a busca linear, o que implica que,

$$-F(x_k + \beta^{\bar{m}_k - 1} d_k)^\top d_k < \sigma_k \beta^{\bar{m}_k - 1} \|d_k\|^2 \quad (79)$$

Além do mais, a limitação das sequências $\{x_k\}$ e $\{d_k\}$ implica que existe pontos de acumulação, digamos \tilde{x} e \tilde{d} e conjuntos de índices infinitos N_1 e N_2 com $N_2 \subset N_1$ tais que,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \tilde{x}, \quad \text{para } k \in N_1$$

e

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d_k = \tilde{d}, \quad \text{para } k \in N_2$$

Portanto, tomando o limite de (79) quando $k \rightarrow \infty$, obtemos o seguinte,

$$F(\tilde{x})^\top \tilde{d} > 0 \quad (80)$$

Por outro lado, tomando limite com $k \rightarrow \infty$ em ambos os lados da condição de descida, temos o seguinte,

$$F(\tilde{x})^\top \tilde{d} \leq 0 \quad (81)$$

Por (45) e (46) temos uma contradição. \square

Lema 4.5. *Suponha que a suposição 3 seja válida. Seja a sequência $\{x_k\}$ gerada pelo Algoritmo 2 se for limitada, então existe uma constante $\widehat{M} > 0$ tal que*

$$\|d_k\| \leq \widehat{M}, \quad \forall k. \quad (82)$$

Teorema 4.2. *Suponha que F seja monótona e as suposição 2 e 3 sejam válidas. Sejam as sequências $\{x_k\}$ e $\{z_k\}$ geradas pelo Algoritmo 2. Então,*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|F(x_k)\| = 0. \quad (83)$$

Temos que a demonstração é semelhante a do Teorema 4.1.

5 Resultados Números

Os testes numéricos foram realizados com o objetivo de analisar o desempenho do método utilizando as duas estratégias para as direções de descida. Consideramos 11 funções teste e 8 pontos iniciais utilizados em [3]. Nos testes, tomamos $n = 500$, $\epsilon = 10^{-6}$, $\sigma = 10^{-4}$, $\beta = 0.6$, $\xi = 0.8$, $m^* = 0.8$, $n^* = -0.1$, $q^* = 0.8$ e $r^* = -0.5$. Além disso, o algoritmo é interrompido quando a norma de $F(x_k)$ atingiu a tolerância estabelecida ou quando o número máximo de 50000 iterações foi excedido. Neste último caso, declaramos que a sequência gerada pelo algoritmo não convergiu. Nas figuras 1, 2 e 3 podemos perceber que as estratégias não resolveram 100% dos problemas testados. Observamos ainda que o MCGP1 ($t = t_1$) obteve melhor desempenho que o MCGP2 ($t = t_2$) em relação aos critérios de tempo de CPU, número de iterações e a avaliação de função. O algoritmo foi implementado na linguagem de programação Julia e está livremente disponibilizado em <https://github.com/petimatematica/MCGP>.

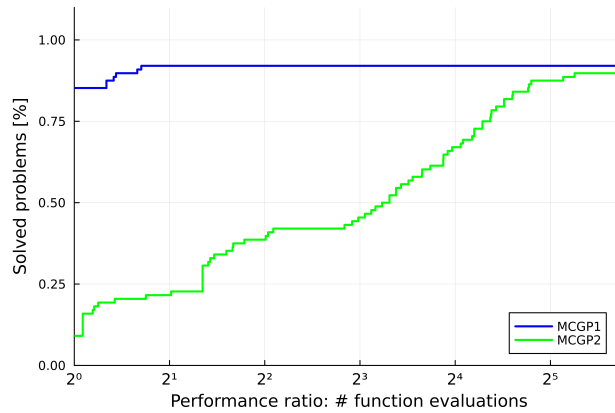


Figura 1: Perfil de desempenho relativo à avaliação de função.

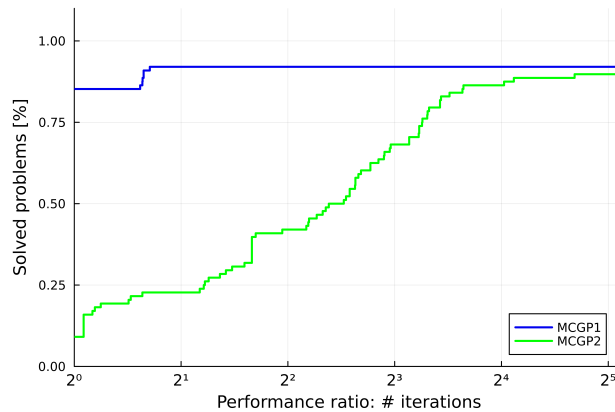


Figura 2: Perfil de desempenho relativo ao número de iterações.

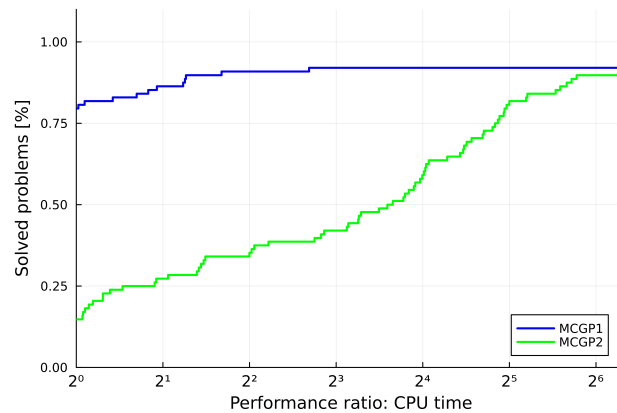


Figura 3: Perfil de desempenho relativo ao tempo de CPU.

Referências

- [1] Sabi’u, J., Shah, A., Stanimirović, P., Ivanov, B. & Waziri, M. Modified optimal Perry conjugate gradient method for solving system of monotone equations with applications. *Applied Numerical Mathematics*. **184**, 431–445 (2023).
- [2] Solodov, M. & Svaiter, B. A globally convergent inexact Newton method for systems of monotone equations. *Reformulation: Nonsmooth, Piecewise Smooth, Semismooth And Smoothing Methods*. 355–369 (1999).
- [3] Waziri, M., Hungu, K. & Sabi’u, J. Descent Perry conjugate gradient methods for systems of monotone nonlinear equations. *Numerical Algorithms*. **85**, 763–785 (2020).
- [4] Gould, N., Orban, D. & Toint, P. CUTEst: a constrained and unconstrained testing environment with safe threads for mathematical optimization. *Computational Optimization And Applications*. **60**, 545–557 (2015).
- [5] Perry, A. A modified conjugate gradient algorithm. *Operations Research*. **26**, 1073–1078 (1978).
- [6] Dai, Y.-H. & Liao, L.-Z. New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods. *Applied Mathematics And Optimization*. **43**, 87–101 (2001).
- [7] Silva, C. Uma estratégia híbrida para o Método dos Gradientes Conjugados não linear. (UFRJ, 2011).