

# Formulário

Equação iterativa		Convergência	
secante	Newton	superlinear	quadrática
$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$	$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$	$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{ x^* - x_{k+1} }{ x^* - x_k ^{1.618}} = L$	$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{ x^* - x_{k+1} }{ x^* - x_k ^2} = L$
Convergência: $\frac{f''(\xi)}{2f'(\eta)}$ . Onde $\xi, \eta \in I$ .		CP: $\frac{ x_{k+1} - x_k }{ x_{k+1} } \leq \epsilon_1$ e $ f(x_{k+1})  \leq \epsilon_2$	

Equação iterativa		CP
Jacobi	Gauss-Seidel	
$Dx^{(k+1)} = (L + U)x^{(k)} + b$	$(D - L)x^{(k+1)} = Ux^{(k)} + b$	$\frac{\ x^{(k+1)} - x^{(k)}\ }{\ x^{(k+1)}\ } \leq \epsilon$
$x^{(k+1)} = C_J x^{(k)} + M^{-1}b$	$x^{(k+1)} = C_{GS} x^{(k)} + M^{-1}b$	
$M = D, DC_J = (L + U)$	$M = (D - L), MC_{GS} = U$	

Jacobiano	Equação iterativa	CP
$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$	$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta_x$ $J(x^{(k)})\Delta_x = -f(x^{(k)})$	$\frac{\ \Delta_x\ }{\ x^{(k+1)}\ } \leq \epsilon_1$ $\ f(x^{(k+1)})\  \leq \epsilon_2$

Polinômio interpolador de Newton:

$$p_n(x) = f_0 + (x - x_0)[x_0, x_1] + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-1})[x_0, \dots, x_n]$$

Erro de truncatura:  $R_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$ , com  $\xi \in [x_0, x_n]$

Expressão do segmento  $i$  da *spline* cúbica

$$s_3^i(x) = \frac{M_{i-1}}{6(x_i - x_{i-1})}(x_i - x)^3 + \frac{M_i}{6(x_i - x_{i-1})}(x - x_{i-1})^3 + \left[ \frac{f_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})} - \frac{M_{i-1}(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x_i - x) + \left[ \frac{f_i}{(x_i - x_{i-1})} - \frac{M_i(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x - x_{i-1}) \text{ para } i = 1, 2, \dots, n$$

Expressão para os pontos interiores (nó  $i$ )

$$(x_i - x_{i-1})M_{i-1} + 2(x_{i+1} - x_{i-1})M_i + (x_{i+1} - x_i)M_{i+1} = \frac{6}{(x_{i+1} - x_i)}(f_{i+1} - f_i) - \frac{6}{(x_i - x_{i-1})}(f_i - f_{i-1})$$

<i>Spline</i> Natural	<i>Spline</i> Completa
$M_0 = 0$	$2(x_1 - x_0)M_0 + (x_1 - x_0)M_1 = \frac{6}{(x_1 - x_0)}(f_1 - f_0) - 6f'_0$
$M_n = 0$	$2(x_n - x_{n-1})M_n + (x_n - x_{n-1})M_{n-1} = 6f'_n - \frac{6}{(x_n - x_{n-1})}(f_n - f_{n-1})$

Erro de truncatura *spline* cúbica  $|f(x) - s_3(x)| \leq \frac{5}{384}h^4 M_4$   $|f'(x) - s'_3(x)| \leq \frac{1}{24}h^3 M_4$  com  $\max_{\xi \in [x_0, x_n]} |f^{(iv)}(\xi)| \leq M_4$   $h = \max_{0 \leq i \leq n-1} (x_{i+1} - x_i)$

Modelo linear

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m \phi_1^2(x_i) & \dots & \sum_{i=1}^m \phi_1(x_i)\phi_n(x_i) \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^m \phi_n(x_i)\phi_1(x_i) & \dots & \sum_{i=1}^m \phi_n^2(x_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m f_i \phi_1(x_i) \\ \dots \\ \sum_{i=1}^m f_i \phi_n(x_i) \end{pmatrix}$$

Resíduos dos mínimos quadrados:  $\sum_{i=1}^m (f_i - M(x_i))^2$

Polinómios ortogonais:  $P_{i+1} = A_i(x - B_i)P_i(x) - C_iP_{i-1}(x)$ ,  $P_0(x) = 1$ ,  $P_{-1}(x) = 0$

$$A_i = 1 \quad B_i = \frac{\langle xP_i(x), P_i(x) \rangle}{\langle P_i(x), P_i(x) \rangle} \quad C_0 = 0 \text{ e } C_i = \frac{\langle P_i(x), P_i(x) \rangle}{\langle P_{i-1}(x), P_{i-1}(x) \rangle}$$

Coeficientes do modelo polinomial  $c_j = \frac{\sum_{i=1}^m f_i P_j(x_i)}{\sum_{i=1}^m P_j(x_i)^2}$ .

#### Método de Nelder-Mead - Notação

Simplex $\langle X_1, \dots, X_{n+1} \rangle$ ordenado por ordem crescente dos valores de $f$		
centroide	$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$	
reflectido	$x_r = (1 + \alpha)\bar{x} - \alpha X_{n+1}$	$\alpha = 1$
expandido	$x_e = \gamma x_r + (1 - \gamma)\bar{x}$	$\gamma = 2$
contraído interior	$x_c = \beta X_{n+1} + (1 - \beta)\bar{x}$	$\beta = \frac{1}{2}$
contraído exterior	$\hat{x}_c = \beta x_r + (1 - \beta)\bar{x}$	$\beta = \frac{1}{2}$
encolher simplex	$x_i = \frac{X_i + X_1}{2}$	
critério de paragem	$\frac{1}{\Delta} \max_{2 \leq i \leq n+1} \ X_i - X_1\  \leq \epsilon$	$\Delta = \max(1, \ X_1\ )$

#### Método de Nelder-Mead - Algoritmo

Dado o Simplex ordenado fazer:

1. Se  $f(x_r) < f(X_n)$  então
  - (a) Se  $f(x_r) \geq f(X_1)$  aceitar reflectido e saltar para o passo 3.
  - (b) Se  $f(x_r) < f(X_1)$  então expandir simplex:
    - i. Se  $f(x_e) < f(X_1)$  então aceitar expandido e saltar para o passo 3.
    - ii. Se  $f(x_e) \geq f(X_1)$  então aceitar reflectido e saltar para o passo 3.
2. Se  $f(x_r) \geq f(X_n)$  então contrair simplex:
  - (a) Se  $f(x_r) \geq f(X_{n+1})$  contrair para o interior.
    - i. Se  $f(x_c) < f(X_n)$  aceita-se o contraído para o interior e saltar para o passo 3.
    - ii. Se  $f(x_c) \geq f(X_n)$  encolhe-se o simplex e saltar para o passo 3.
  - (b) Se  $f(x_r) < f(X_{n+1})$  contrair para o exterior.
    - i. Se  $f(\hat{x}_c) < f(X_n)$  aceita-se o contraído para o exterior e saltar para o passo 3.
    - ii. Se  $f(\hat{x}_c) \geq f(X_n)$  encolhe-se o simplex e saltar para o passo 3.
3. Se o critério de paragem não for verificado iniciar nova iteração.

Redução significativa (critério de Armijo):  $f(x^{(k)}) - f(x^{(k)} + \omega^j \alpha d^{(k)}) \geq -\mu_1 \omega^j \alpha g(x^{(k)})^T d^{(k)}$ .

Divisões sucessivas de  $\alpha$  por dois consiste em usar  $\omega = 0.5$ ,  $\alpha = 1$  e determinar o menor  $j$  inteiro ( $j = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) que provoca uma redução significativa.

Direcção de descida:  $g(x^{(k)})^T d^{(k)} \leq \eta \|g(x^{(k)})\| \|d^{(k)}\|$ .

Quase ortogonal:  $|g(x^{(k)})^T d^{(k)}| \leq \eta \|g(x^{(k)})\| \|d^{(k)}\|$ .

Critério de paragem:  $\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k+1)}\|} \leq \epsilon_1$  e  $\frac{|f^{(k+1)} - f^{(k)}|}{|f^{(k+1)}|} \leq \epsilon_2$  e  $\|g^{(k+1)}\| \leq \epsilon_3$

## Método de Descida Máxima - Algoritmo

Em cada iteração fazer:

1. Calcular  $d^{(k)} = -g(x^{(k)})$ .
2. Usando divisões sucessivas de  $\alpha$  por dois determinar  $\alpha^{(k)}$ .
3. Fazer  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)}d^{(k)}$ .
4. Se o critério de paragem não for verificado iniciar nova iteração.

## Método de segurança de Newton - Algoritmo

Em cada iteração fazer:

1. Resolver o sistema linear  $G(x^{(k)})d^{(k)} = -g(x^{(k)})$ . Se o sistema não tiver solução única fazer  $d^{(k)} = -g^{(k)}$  e ir para o passo 4.
2. Se a direcção for *quase* ortogonal ao gradiente fazer  $d^{(k)} = -g^{(k)}$  e ir para o passo 4.
3. Se a direcção não for de descida fazer  $d^{(k)} = -d^{(k)}$ .
4. Usando divisões sucessivas de  $\alpha$  por dois determinar  $\alpha^{(k)}$ .
5. Fazer  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)}d^{(k)}$ .
6. Se o critério de paragem não for verificado iniciar nova iteração.

## Método quasi-Newton

Aproximação à inversa da Hessiana BFGS:  $H^{(0)} = I$

$$H^{(k+1)} = \left( I - \frac{s^{(k)}y^{(k)T}}{s^{(k)T}y^{(k)}} \right) H^{(k)} \left( I - \frac{y^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}} \right) + \frac{s^{(k)}s^{(k)T}}{s^{(k)T}y^{(k)}}$$

$$s^{(k)} = \alpha^{(k)}d^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \text{ e } y^{(k)} = g^{(k+1)} - g^{(k)}$$

## Método quasi-Newton - Algoritmo

Em cada iteração fazer:

1. Calcular  $d^{(k)} = -H^{(k)}g(x^{(k)})$ .
2. Usando divisões sucessivas de  $\alpha$  por dois determinar  $\alpha^{(k)}$ .
3. Fazer  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)}d^{(k)}$ .
4. Se o critério de paragem não for verificado então calcular  $H^{(k+1)}$  e iniciar nova iteração.