

Aulas de Optimização Numérica

L. Nunes Vicente, Universidade de Coimbra

Mestrado em Matemática

Ano Lectivo de 2015/2016

<http://www.mat.uc.pt/~lnv>

- 1 Métodos numéricos para optimização não linear sem restrições
 - Métodos de procura directa
 - Métodos de procura unidireccional (geral)
 - Métodos de procura unidireccional (descida máxima, Newton)
 - Métodos de região de confiança
- 2 Teoria da optimização não linear com restrições
 - Introdução e qualificações de restrições
 - Condições de primeira ordem
 - Condições de segunda ordem
 - Teoria da dualidade
- 3 Métodos numéricos para optimização não linear com restrições
 - Método da penalização quadrática
 - Método do Lagrangeano aumentado
 - Programação Sequencial Quadrática (SQP)
 - Métodos de pontos interiores

A otimização sem derivadas corresponde a uma classe de técnicas de otimização não linear.

A otimização sem derivadas é utilizada em situações em que **não conhecemos as derivadas** da função a otimizar.

Aplica-se, desta forma, a funções do tipo **caixa-preta** (simulação computacional)



Existem situações em que aproximações das derivadas com recurso a diferenças finitas não são apropriadas:

- Quando o cálculo do valor da função é **dispendioso**,
- Quando estamos na presença de **ruído**.

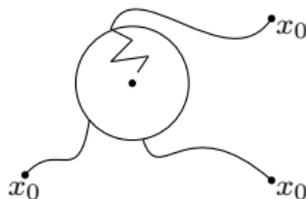
Simplificando, todos os **algoritmos sem derivadas globalmente convergentes** devem:

- Garantir alguma forma de **decrécimo longe da estacionaridade**.
- Garantir algum **controlo da geometria** dos conjuntos da amostra onde o valor da função objectivo é calculado.
- Implicar a convergência do **comprimento do passo para zero**, indicando a convergência global para um ponto estacionário.

Por convergência global entendemos convergência para alguma forma de estacionaridade a partir de um ponto inicial arbitrário.

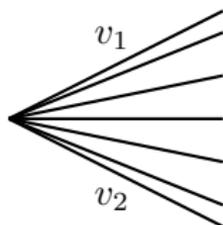


	Local	Global
Minimizantes	Minimizante local = Minimizante relativo	Minimizante global = Minimizante absoluto
Convergência de Algoritmos	Refere-se à taxa de rapidez (sublinear, linear, superlinear, quadrática) numa vizinhança de um determinado minimizante	Refere-se à capacidade de aproximação a pontos estacionários independentemente do ponto de partida



O conjunto gerado **positivamente** por $\{v_1, \dots, v_r\}$ é o cone convexo

$$\{v \in \mathbb{R}^n : v = \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_r v_r, \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, r\}.$$

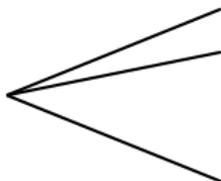


Definição

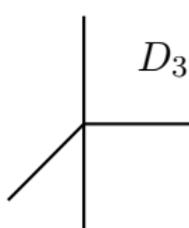
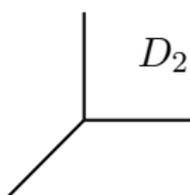
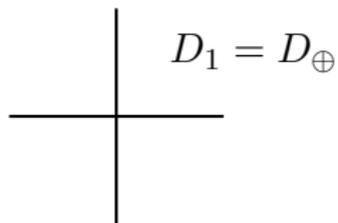
Um conjunto gerador positivo de \mathbb{R}^n é um conjunto de vetores de \mathbb{R}^n que o gera positivamente.

Definição

$\{v_1, \dots, v_r\}$ é **positivamente dependente** se um dos vectores estiver no cone convexo gerado pelos restantes.



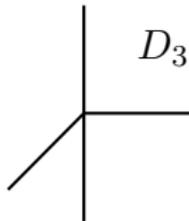
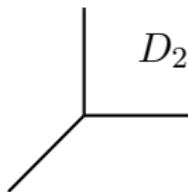
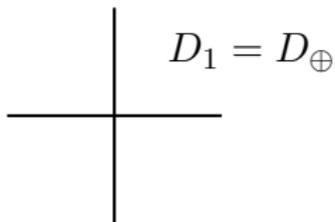
Exemplo: Consideremos \mathbb{R}^2



$$D_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad D_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \quad D_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -1 \end{bmatrix}$$

Definição

Uma **base positiva** de \mathbb{R}^n é um conjunto positivamente independente que gera positivamente \mathbb{R}^n .

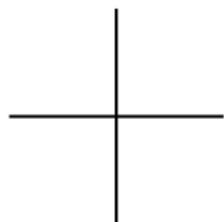


D_1 é uma base positiva.

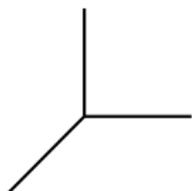
D_2 é uma base positiva.

D_3 é um cgp que não é base positiva.

As bases positivas **não** podem ter menos do que $n + 1$ elementos (minimais) e mais do que $2n$ elementos (maximais):



caso maximal ($2n$ elementos),



caso minimal ($n + 1$ elementos).

Teorema

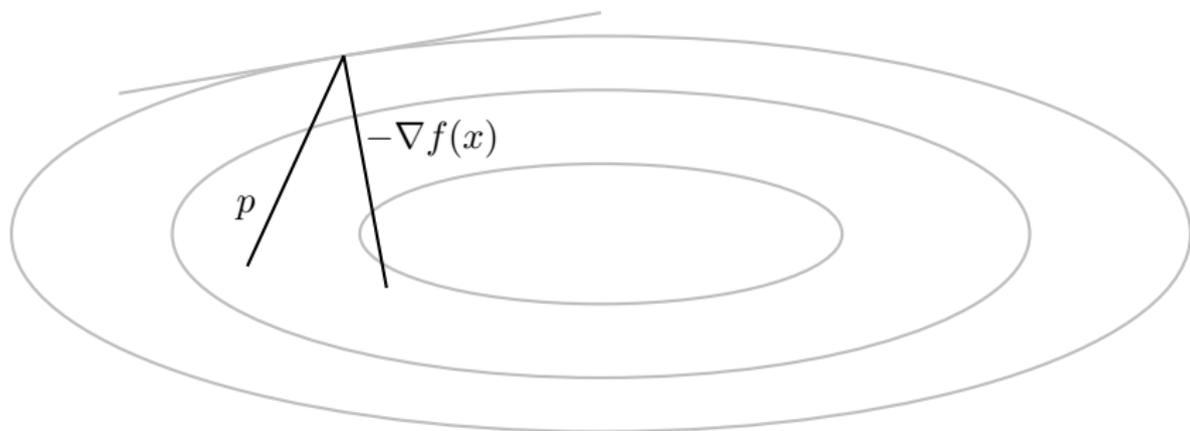
Seja $\{v_1, \dots, v_r\}$, em que $v_i \neq 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, r\}$, um conjunto gerador de \mathbb{R}^n . Então são equivalentes as seguintes propriedades:

- (i) $\{v_1, \dots, v_r\}$ gera positivamente \mathbb{R}^n .
- (ii) $\forall i \in \{1, \dots, r\}$, $-v_i \in$ cone convexo gerado pelos restantes $r - 1$.
- (iii) $\exists \alpha_1, \dots, \alpha_r$ positivos tais que $\sum_{i=1}^r \alpha_i v_i = 0$.
- (iv) $\forall w \neq 0 \exists i \in \{1, \dots, r\}: w^\top v_i > 0$.

Relembremos que:

- 1 p é direcção de descida em x , se $\exists \bar{\alpha} > 0$: $f(x + \alpha p) < f(x)$,
 $\forall \alpha \in (0, \bar{\alpha}]$.
- 2 Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável em x tal que $\nabla f(x) \neq 0$.

Se $(-\nabla f(x))^\top p > 0$, então p é direcção de descida.



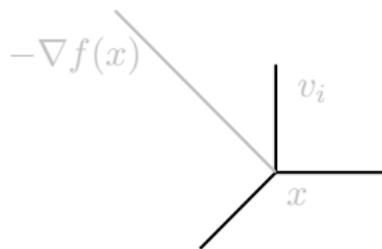
Seja $\{v_1, \dots, v_r\}$ um cgp de \mathbb{R}^n .

Da propriedade (iv) do teorema anterior, temos que

$$\exists i \in \{1, \dots, r\} : (-\nabla f(x))^\top v_i > 0$$

Isto é,

$\exists i \in \{1, \dots, r\} : v_i$ é uma **direcção de descida!**



Definição

A medida de coseno de um cgp D (com vectores todos não nulos) é dada por

$$\text{cm}(D) = \min_{0 \neq v \in \mathbb{R}^n} \max_{d \in D} \frac{v^\top d}{\|v\| \|d\|}$$

Se D é um cgp, então $\text{cm}(D) > 0$.

Exemplo:

Sendo $D_\oplus = [I \quad -I]$ (I identidade $n \times n$), temos que $\text{cm}(D_\oplus) = \frac{1}{\sqrt{n}}$.

Considerando $n = 2$, vem que $\text{cm}(D_\oplus) = \frac{\sqrt{2}}{2}$.

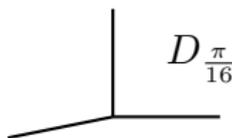
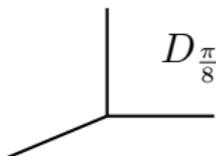
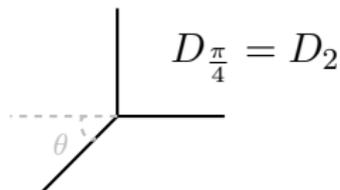
Exemplo: Consideremos

$$D_\theta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\cos(\theta) \\ 0 & 1 & -\sin(\theta) \end{bmatrix}$$

com $\theta \in (0, \pi/4]$.

A medida do coseno de D_θ é igual a $\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)$.

Note-se que à medida que θ tende para zero, $\text{cm}(D_\theta)$ converge para zero



Como construir bases positivas?

Teorema

Se $\{v_1, \dots, v_r\}$ é uma base positiva de \mathbb{R}^n e $W \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz não singular, então

$$\{Wv_1, \dots, Wv_r\} \text{ é uma base positiva de } \mathbb{R}^n.$$

Demonstração: Como $\{v_1, \dots, v_r\}$ gera \mathbb{R}^n , $W[v_1, \dots, v_r]$ gera \mathbb{R}^n também.

Seja $0 \neq w \in \mathbb{R}^n$. Logo, pela propriedade (iv) (referida anteriormente), vem

$$\exists v_i : \underbrace{(W^\top w)}_{\neq 0}^\top v_i > 0$$

$$\exists Wv_i : w^\top (Wv_i) > 0$$

Assim, $W[v_1, \dots, v_r]$ gera \mathbb{R}^n positivamente.

Por outro lado, é fácil provar que como $\{v_1, \dots, v_r\}$ é positivamente independente, também $\{Wv_1, \dots, Wv_r\}$ o é.

Teorema

$\begin{bmatrix} I & -I \end{bmatrix}$ é uma base positiva (I identidade $n \times n$).

$\begin{bmatrix} I & -e \end{bmatrix}$ é uma base positiva ($e = (1, \dots, 1)^\top$).

Logo, $\begin{bmatrix} W & -W \end{bmatrix}$ e $\begin{bmatrix} W & -\sum_{i=1}^n w_i \end{bmatrix}$ são também bases positivas.

Repare-se que, dado $v \neq 0$,

$$\text{cm}(D) \leq \max_{d \in D} \frac{v^\top d}{\|v\| \|d\|}$$

Ou seja,

$$\exists \bar{d} \in D : \quad \text{cm}(D) \leq \frac{v^\top \bar{d}}{\|v\| \|\bar{d}\|}$$

De modo equivalente,

$$\text{cm}(D) \|v\| \|\bar{d}\| \leq v^\top \bar{d}$$

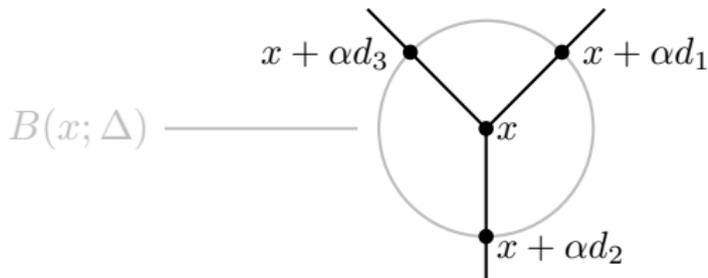
Teorema

Seja D um cgp e $\alpha > 0$. Seja

$$\Delta = \alpha \max_{d \in D} \|d\|$$

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que ∇f é contínuo à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) num aberto contendo $B(x; \Delta)$. Se $f(x) \leq f(x + \alpha d) \quad \forall d \in D$, então

$$\|\nabla f(x)\| \leq \left(\frac{\nu}{2} \text{cm}(D)^{-1} \max_{d \in D} \|d\| \right) \alpha$$



Demonstração: Por hipótese, temos (para todos os $\bar{d} \in D$)

$$0 \leq f(x + \alpha\bar{d}) - f(x)$$

Aplicando uma expansão de Taylor, vem

$$0 \leq f(x + \alpha\bar{d}) - f(x) = \int_0^1 \nabla f(x + t\alpha\bar{d})^\top (\alpha\bar{d}) dt$$

Seja $\bar{d} \in D$ tal que

$$\text{cm}(D) \|\nabla f(x)\| \|\bar{d}\| \leq -\nabla f(x)^\top \bar{d}$$

Multiplicando por α , vem

$$\alpha \text{cm}(D) \|\nabla f(x)\| \|\bar{d}\| \leq -\nabla f(x)^\top \alpha\bar{d}$$

Somando a desigualdade

$$0 \leq \int_0^1 \nabla f(x + t\alpha\bar{d})^\top (\alpha\bar{d}) dt$$

com a desigualdade

$$\alpha \text{cm}(D) \|\nabla f(x)\| \|\bar{d}\| \leq -\nabla f(x)^\top \alpha\bar{d} = \int_0^1 -\nabla f(x)^\top (\alpha\bar{d}) dt$$

vem que

$$\begin{aligned}\alpha \operatorname{cm}(D) \|\nabla f(x)\| \|\bar{d}\| &\leq \int_0^1 [\nabla f(x + t\alpha\bar{d}) - \nabla f(x)]^\top (\alpha\bar{d}) dt \\ &\leq \frac{\nu}{2} \alpha^2 \|\bar{d}\|^2\end{aligned}$$

Logo,

$$\|\nabla f(x)\| \leq \left(\frac{\nu}{2} \operatorname{cm}(D)^{-1} \|\bar{d}\| \right) \alpha \leq \left(\frac{\nu}{2} \operatorname{cm}(D)^{-1} \max_{d \in D} \|d\| \right) \alpha$$



Exercícios:

- Prove que $\begin{bmatrix} I & -I \end{bmatrix}$ é uma base positiva (maximal) com medida de coseno $1/\sqrt{n}$.
- Mostre que a medida do coseno de um cgp é sempre positiva.
- Seja $\rho : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ tal que

$$f(x + \alpha d) > f(x) - \rho(\alpha) \quad \forall d \in D$$

Mostre (no contexto do respectivo teorema) que

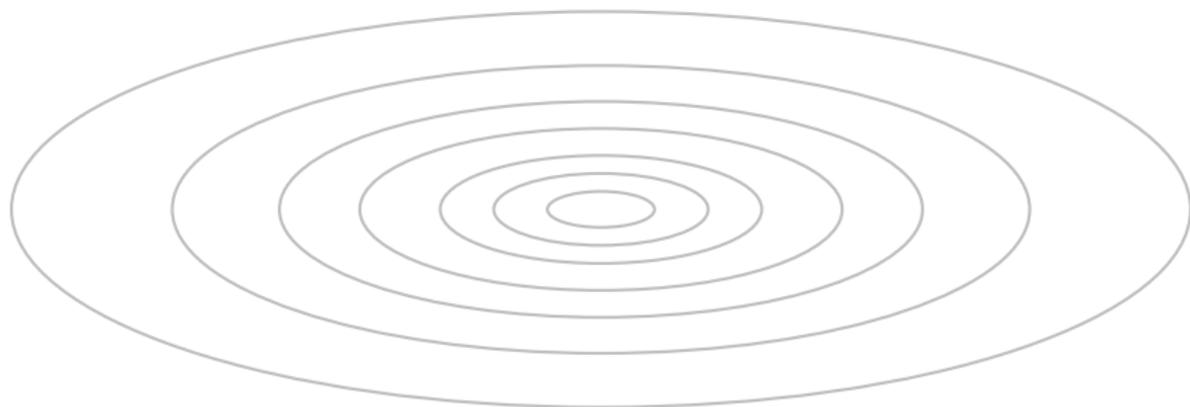
$$\|\nabla f(x)\| \leq \left(\frac{v}{2} \text{cm}(D)^{-1} \max_{d \in D} \|d\| \right) \alpha + \left(\frac{\text{cm}(D)^{-1}}{\min_{d \in D} \|d\|} \right) \frac{\rho(\alpha)}{\alpha}$$

Os **métodos de procura directa** são métodos de optimização sem derivadas.

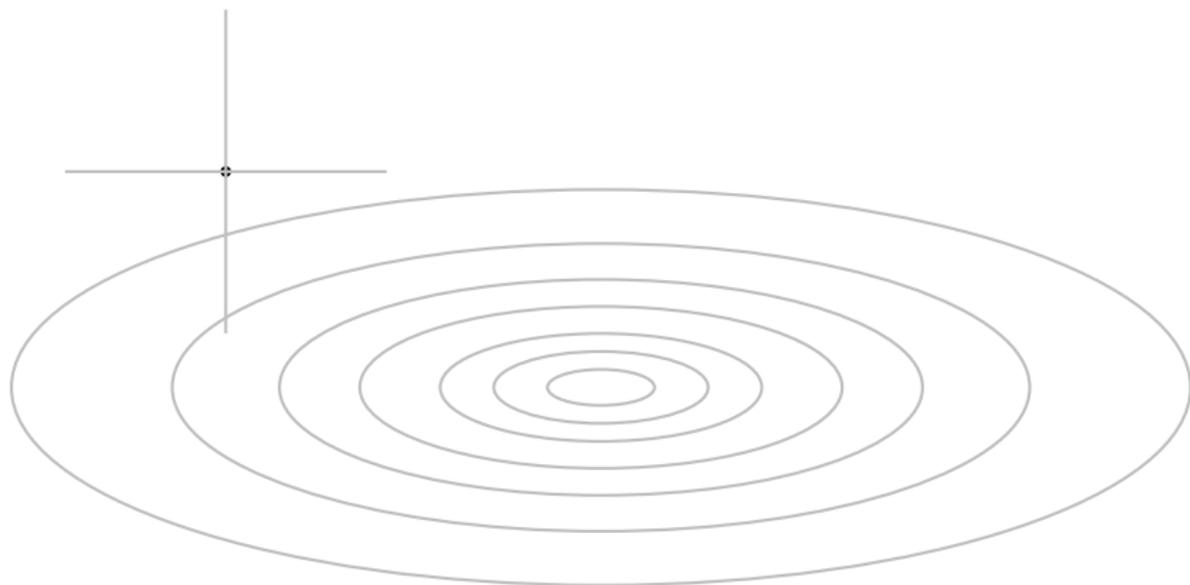
São métodos que calculam o valor da função objectivo, em cada iteração, num número finito de pontos.

Em cada iteração decidem que acções tomar, baseando-se **apenas** nesses valores (mais rigorosamente, entre comparações entre eles).

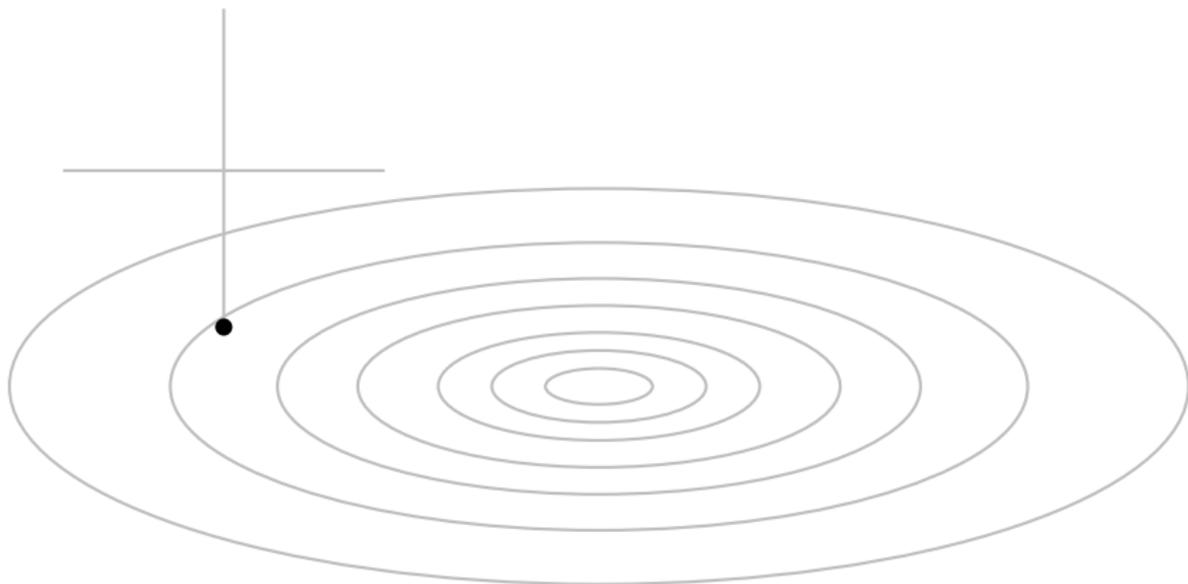
O mais simples método de procura directa é a **procura coordenada**.



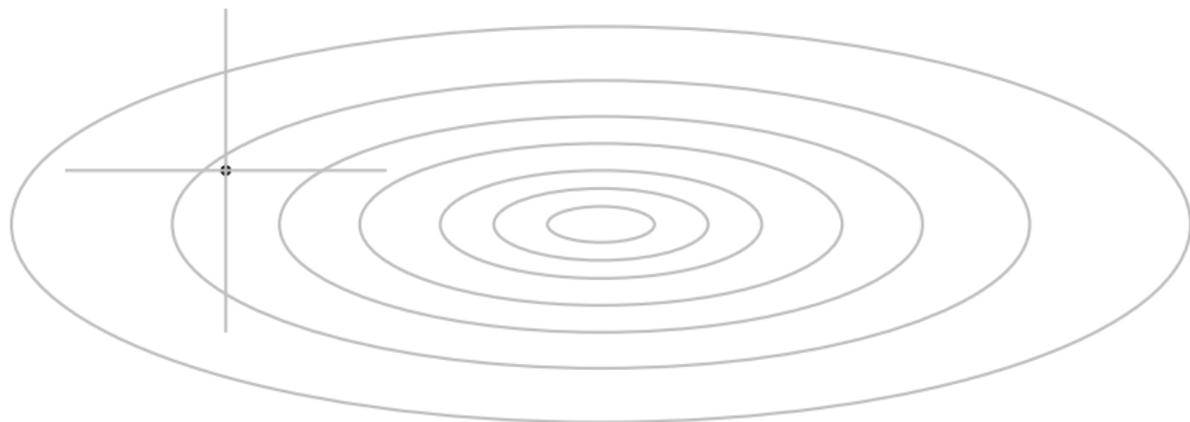
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



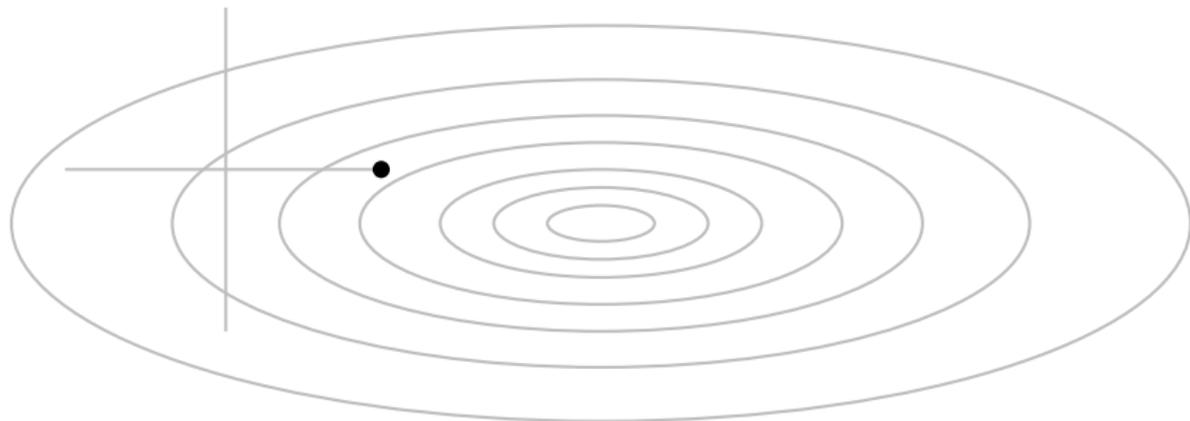
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



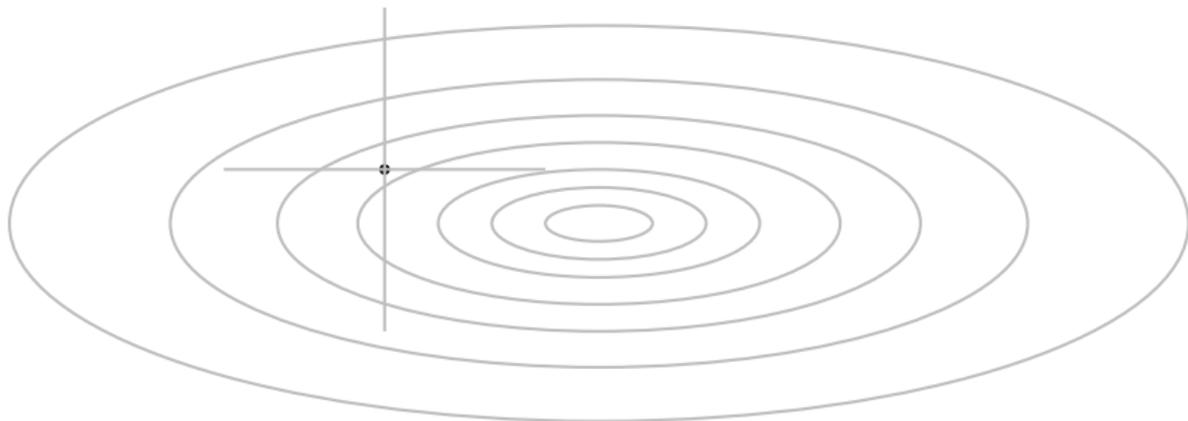
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



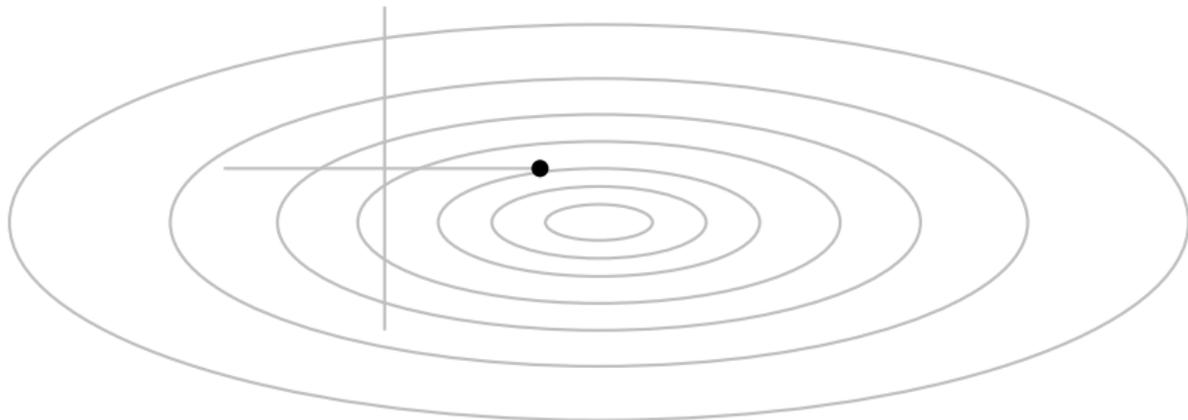
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



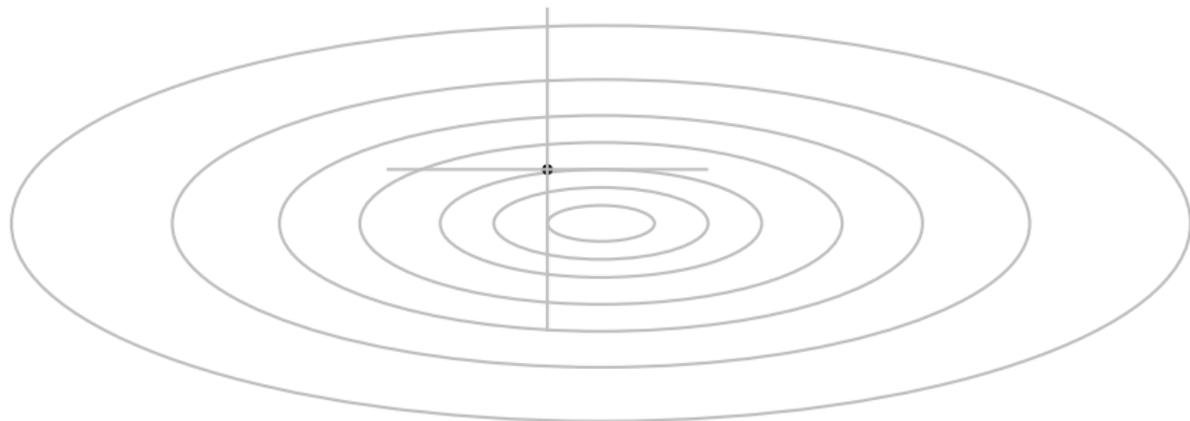
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



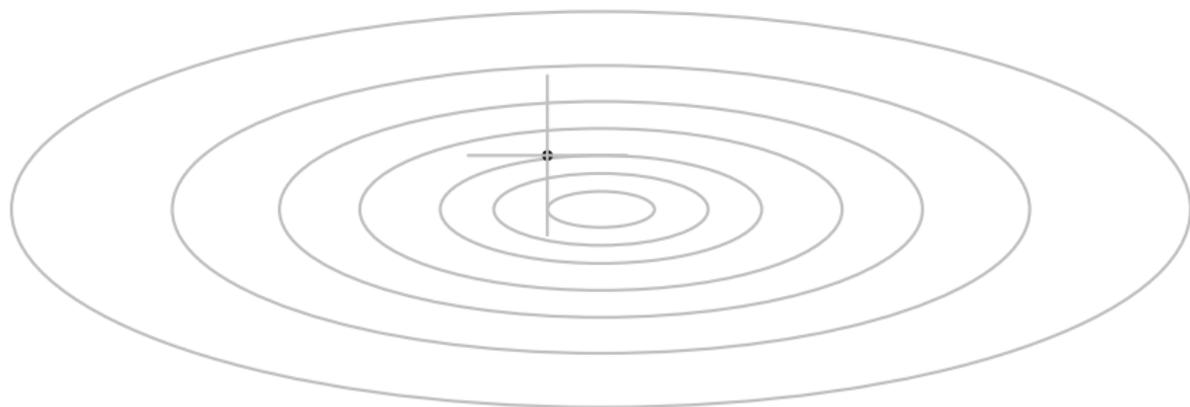
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



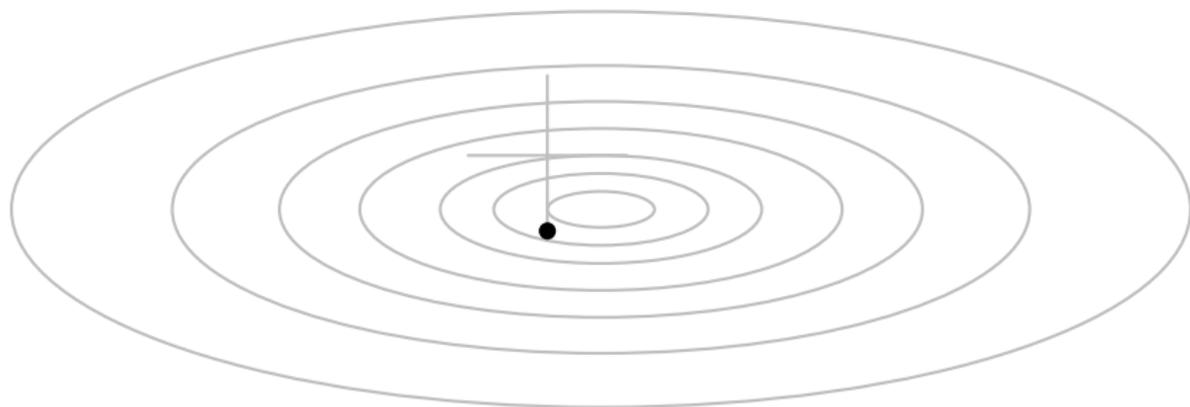
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



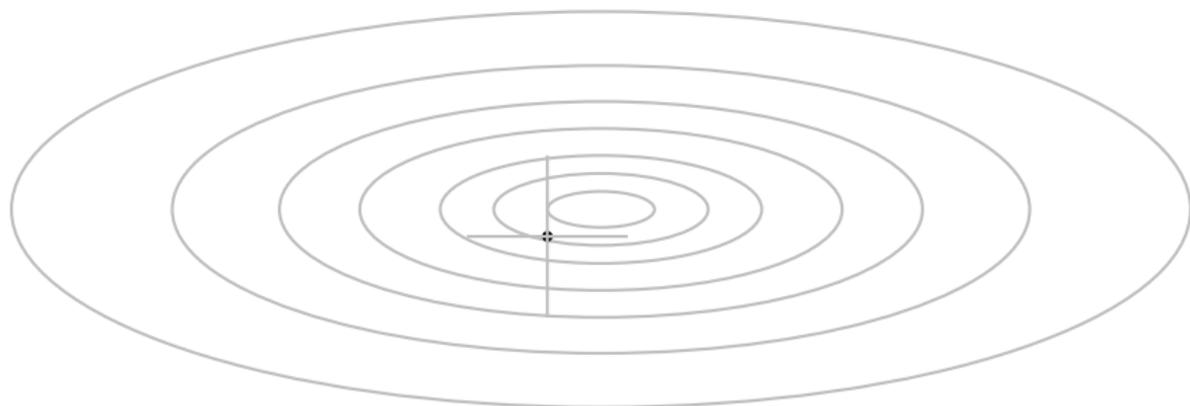
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



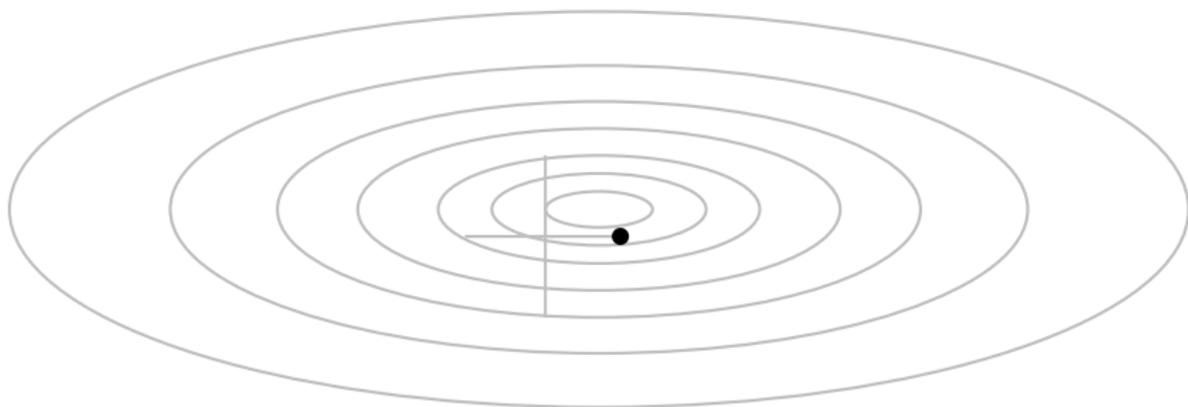
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



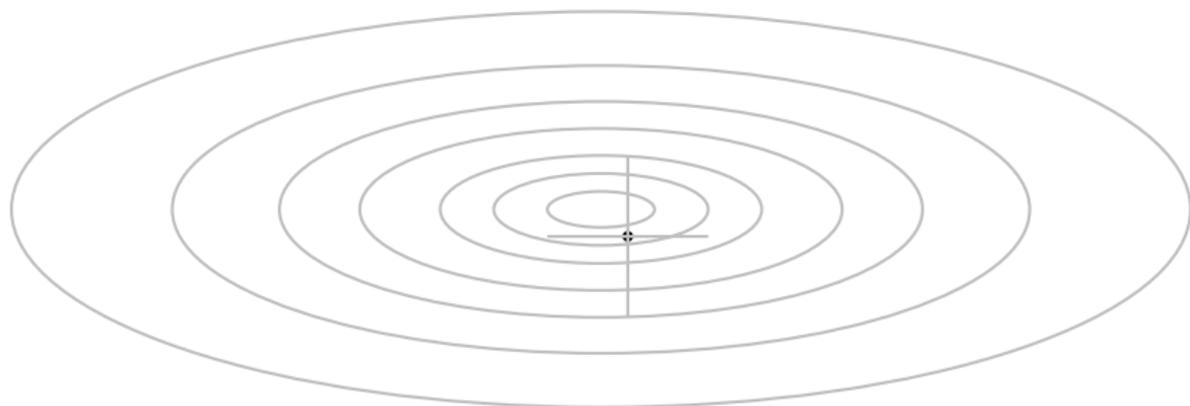
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



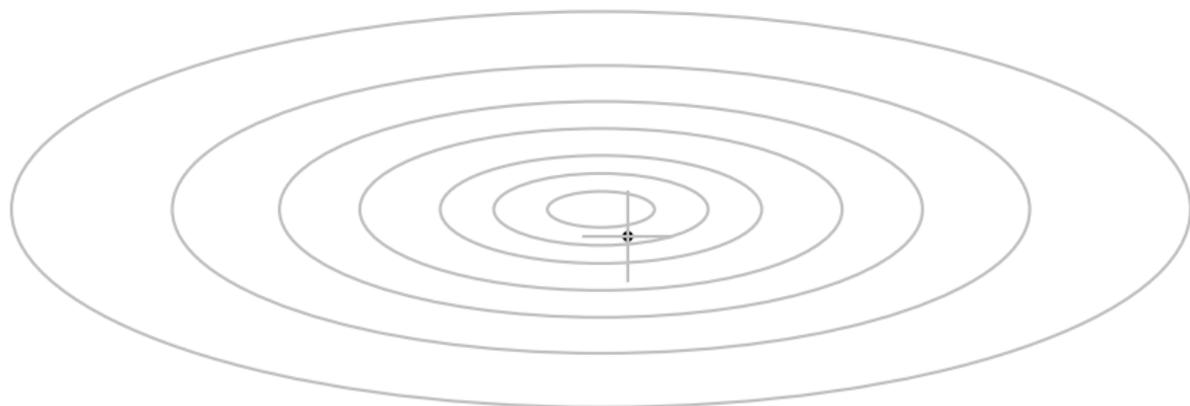
Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)



Método da Procura Coordenada (passo de sondagem)

Algoritmo (Método da procura coordenada)

Inicialização

Escolher x_0 e $\alpha_0 > 0$.

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

- 1 **Passo de procura:** Vazio, por enquanto.
- 2 **Passo de sondagem:** Ordenar o conjunto de sondagem $P_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_{\oplus}\}$.

Começar a calcular o valor de f em P_k e parar se $\exists d_k \in D_{\oplus} : f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.

Nesse caso, fazer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e declarar a iteração e o passo de sondagem bem sucedidos.

Caso contrário, declarar a iteração e o passo de sondagem mal sucedidos e fazer $x_{k+1} = x_k$.

Algoritmo (continuação)

3 Actualização do comprimento do passo:

$$\alpha_{k+1} = \begin{cases} \alpha_k \text{ (ou } 2\alpha_k) & \text{se a iteração for bem sucedida} \\ \frac{\alpha_k}{2} & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Este método possui propriedades de **convergência global** tal e qual como está apresentado.

Porém, vamos provar a convergência global para uma versão modificada.

Ao invés de D_{\oplus} passaremos a considerar D um qualquer cgp.

Consideraremos também

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) - \rho(\alpha_k)$$

onde $\rho(\cdot)$ é uma função força.

Uma função força, $\rho : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$, é tipicamente contínua e satisfaz

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\rho(t)}{t} = 0 \quad \text{e} \quad \rho(t_1) \leq \rho(t_2) \quad \text{se} \quad t_1 < t_2.$$

Um exemplo simples de uma função força é $\rho(t) = t^2$. Na prática usa-se $\rho(t) = Ct^2$, com $C > 0$ muito pequeno.

Aproveitamos e generalizamos o método para a chamada **procura directa do tipo direccional** (um pouco mais geral).

Algoritmo (Método da procura directa do tipo direccional)

Inicialização

Escolher $x_0, \alpha_0 > 0$.

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

- ➊ **Passo de procura:** Tentar calcular um ponto x tal que $f(x) \leq f(x_k) - \rho(\alpha_k)$, calculando o valor de f num número finito de pontos.

Se tal ponto for encontrado, fazer $x_{k+1} = x$, declarar a iteração e o passo de procura como bem sucedidos e saltar o passo de sondagem.

Algoritmo (continuação)

- 2 **Passo de sondagem:** Ordenar o conjunto de sondagem

$$P_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D\}.$$

Começar a calcular o valor de f em P_k e parar se

$$\exists d_k \in D : f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) - \rho(\alpha_k).$$

Nesse caso, fazer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e declarar a iteração e o passo de sondagem bem sucedidos.

Caso contrário, declarar a iteração e o passo de sondagem mal sucedidos e fazer $x_{k+1} = x_k$.

- 3 **Actualização do comprimento do passo:**

$$\alpha_{k+1} = \begin{cases} \alpha_k \text{ (ou } 2\alpha_k) & \text{se a iteração for bem sucedida} \\ \frac{\alpha_k}{2} & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Hipótese (H1)

f é limitada inferiormente no conjunto de nível

$$L(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}.$$

Hipótese (H2)

O gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) num aberto contendo $L(x_0)$.

Lema

Supondo (H1), \exists uma sucessão K de iterações sem sucesso:

$$\lim_{k \in K} \alpha_k = 0$$

Demonstração: Suponhamos que $\exists \bar{\alpha} > 0 : \alpha_k \geq \bar{\alpha} \quad \forall k$.

Suponhamos, também, que existe uma infinidade de iterações com sucesso.

Nesse caso, para um número infinito de k 's e para as iterações com sucesso temos

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \rho(\alpha_k) \iff \underbrace{-f(x_k) + f(x_{k+1})}_{\substack{\downarrow f^* \quad \downarrow f^* \\ \underbrace{\hspace{2cm}} \\ \downarrow \\ 0}} \leq -\rho(\alpha_k) \leq \underbrace{-\rho(\bar{\alpha})}_{\text{negativo}}$$

porque $\{f(x_k)\}$ é uma sucessão decrescente e limitada inferiormente.

Logo, chegou-se a uma contradição e não pode haver uma infinidade de iterações com sucesso.

Mas, também, não pode haver, a partir de certa ordem, sempre iterações sem sucesso pois isso contradiz a hipótese de redução ao absurdo.

Provou-se então que:

$$\exists \bar{K} : \lim_{k \in \bar{K}} \alpha_k = 0$$

Logo, tem de haver uma infinidade de passos de sondagem mal sucedidos.

Seja K_u^1 o conjunto de iterações correspondentes a passos de sondagem mal sucedidos.

Seja $k \in K_u^2$ uma subsucessão de K_u^1 tal que $\lim_{k \in K_u^2} \alpha_{k+1} = 0$.

Como $\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_k}{2}$, temos que $\lim_{k \in K_u^2} \alpha_k = 0$.

Para terminar a demonstração, basta fazer $K = K_u^2$.



Teorema

Supondo (H1) e (H2), \exists uma subsucessão K de iterações sem sucesso tal que

$$\lim_{k \in K} \nabla f(x_k) = 0$$

Demonstração: Seja K como no lema anterior. Sabe-se que

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \left(\frac{\nu}{2} \text{cm}(D)^{-1} \max_{d \in D} \|d\| \right) \alpha_k + \left(\frac{\text{cm}(D)^{-1}}{\min_{d \in D} \|d\|} \right) \frac{\rho(\alpha_k)}{\alpha_k}$$

Tendo em conta que

$$\alpha_k \longrightarrow 0 \quad \text{e} \quad \frac{\rho(\alpha_k)}{\alpha_k} \longrightarrow 0, \quad \text{vem que} \quad \lim_{k \in K} \nabla f(x_k) = 0.$$



Notas:

- Se adicionalmente $\{x_k\}$ for limitada, então prova-se que tem um ponto de acumulação x_* tal que $\nabla f(x_*) = 0$.
- É possível generalizar esta demonstração ao caso em que em vez de um conjunto D se usa um número infinito deles, desde que existam constantes positivas $d_{min} < d_{max}$ e C_{min} tais que, para todos esses D 's,

$$\text{cm}(D) \geq C_{min}, \quad \max_{d \in D} \|d\| \leq d_{max} \quad \text{e} \quad \min_{d \in D} \|d\| \geq d_{min}.$$

- É possível, também, substituir $\alpha_{k+1} = \frac{\alpha_k}{2}$ por $\alpha_{k+1} \in [\beta_1 \alpha_k, \beta_2 \alpha_k]$, com $0 < \beta_1 \leq \beta_2 < 1$.

Exercícios:

- Demonstre o teorema anterior, utilizando

$$f(x_k) < \min_{d \in D} f(x_k + \alpha_k d) + \rho(\alpha_k)$$

e aplicando uma expansão de Taylor de primeira ordem e recorrendo ao teorema da caracterização dos cgp's.

- Implemente o método da procura coordenada em Matlab. Aplique-o à minimização da função de Rosenbrock

$$100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2$$

Parta de $(-1, 1)^\top$ e de $(1.2, 0)^\top$. Introduza em D os vectores

$\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ e $\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}$. Compare os resultados obtidos

(traçando gráficos dos valores de f em função do número de cálculos dos valores da função).

- 1 Métodos numéricos para optimização não linear sem restrições
 - Métodos de procura directa
 - Métodos de procura unidireccional (geral)
 - Métodos de procura unidireccional (descida máxima, Newton)
 - Métodos de região de confiança
- 2 Teoria da optimização não linear com restrições
 - Introdução e qualificações de restrições
 - Condições de primeira ordem
 - Condições de segunda ordem
 - Teoria da dualidade
- 3 Métodos numéricos para optimização não linear com restrições
 - Método da penalização quadrática
 - Método do Lagrangeano aumentado
 - Programação Sequencial Quadrática (SQP)
 - Métodos de pontos interiores

Nos métodos de procura unidireccional, a iteração é dada por

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

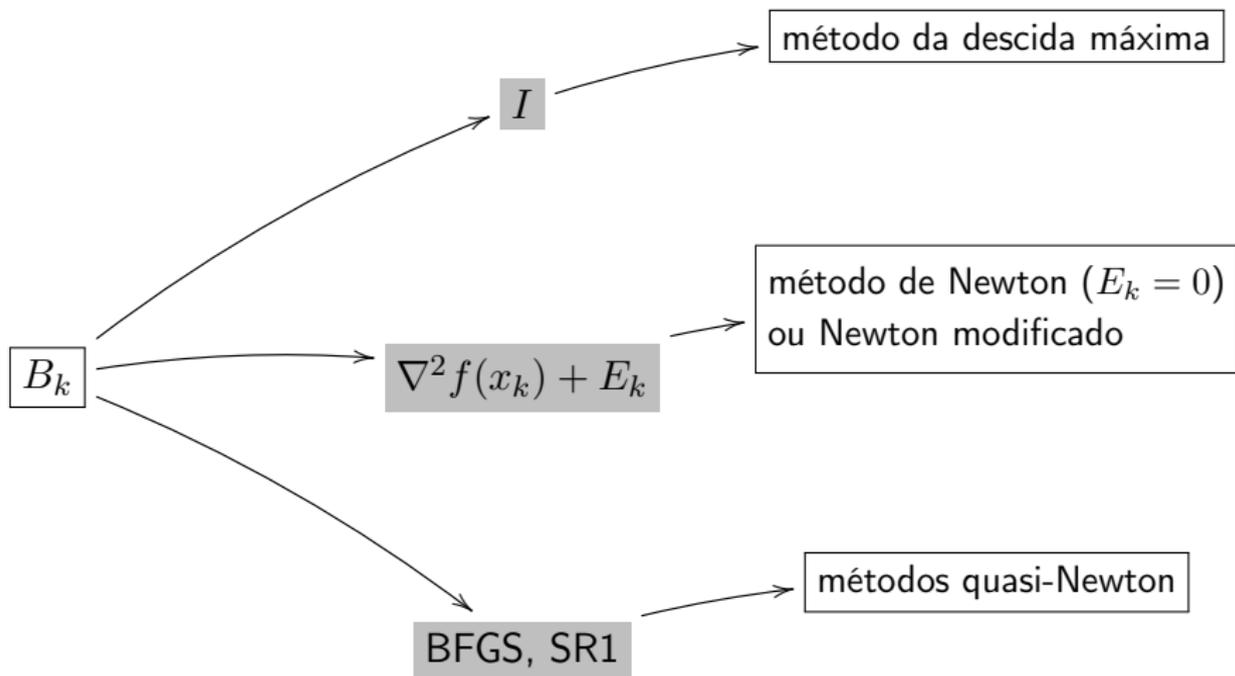
O bom desempenho de um método de procura unidireccional depende das escolhas da direcção p_k e do comprimento do passo α_k .

De preferência p_k é uma direcção de descida e logo supomos que $p_k^\top \nabla f(x_k) < 0$ (desta forma temos a garantia de que f decresce ao longo desta direcção).

A direcção de procura p_k tem tipicamente a forma

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$$

onde B_k é uma matriz simétrica não singular, de preferência positiva definida.



Como escolher o comprimento do passo (α_k)?

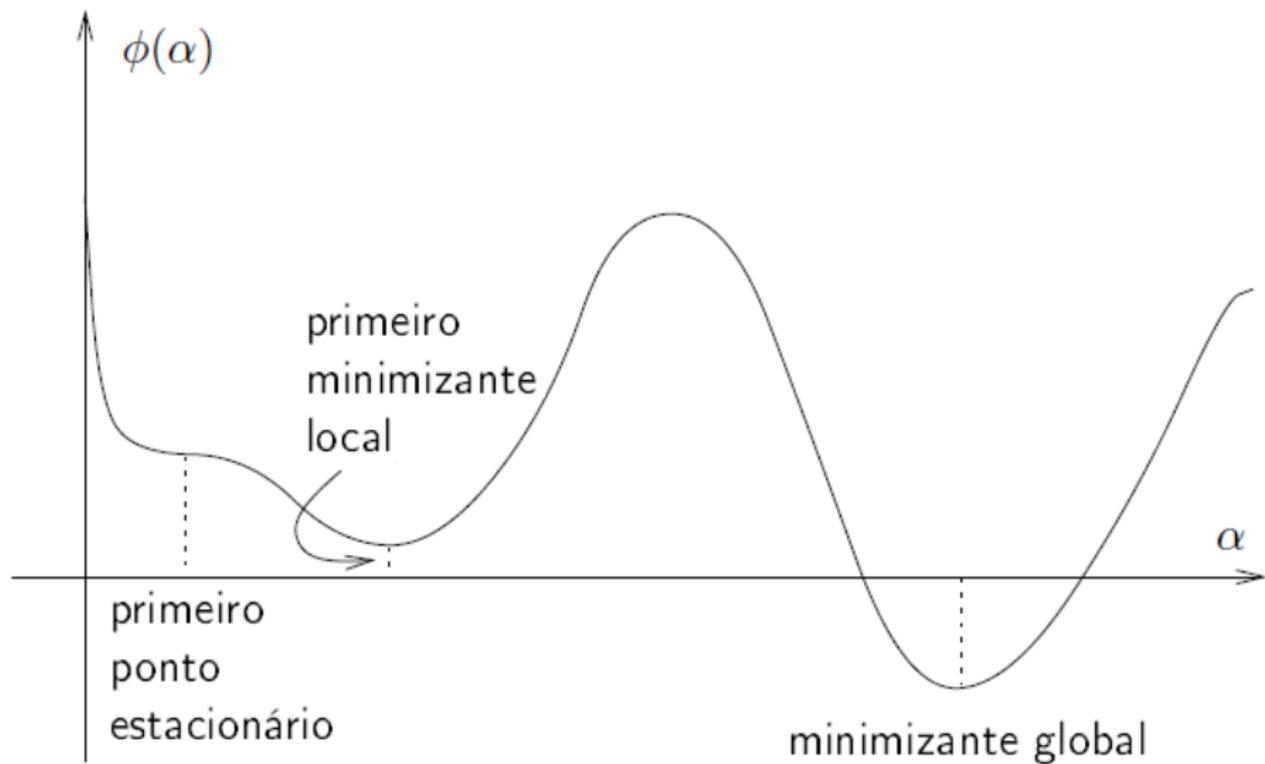
A escolha de α_k deverá conduzir a um decréscimo substancial de f e ser pouco dispendiosa.

Neste sentido, vamos tentar decrescer

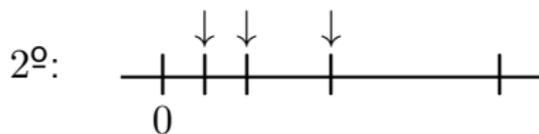
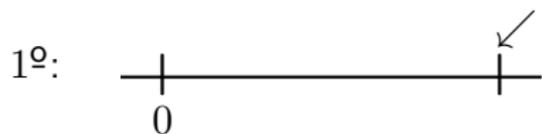
$$\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k) \quad \alpha \geq 0$$

a partir de $\alpha = 0$.

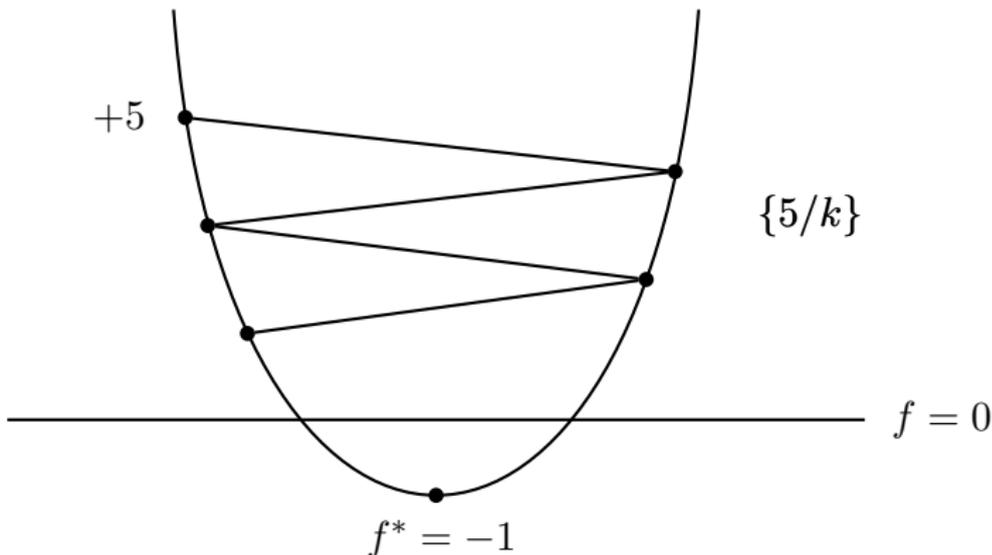
Contudo, minimizar $\phi(\alpha)$ pode ser custoso.



Pretende-se testar um nº finito (reduzido) de valores para α , e.g.



O decréscimo simples **não funciona!**

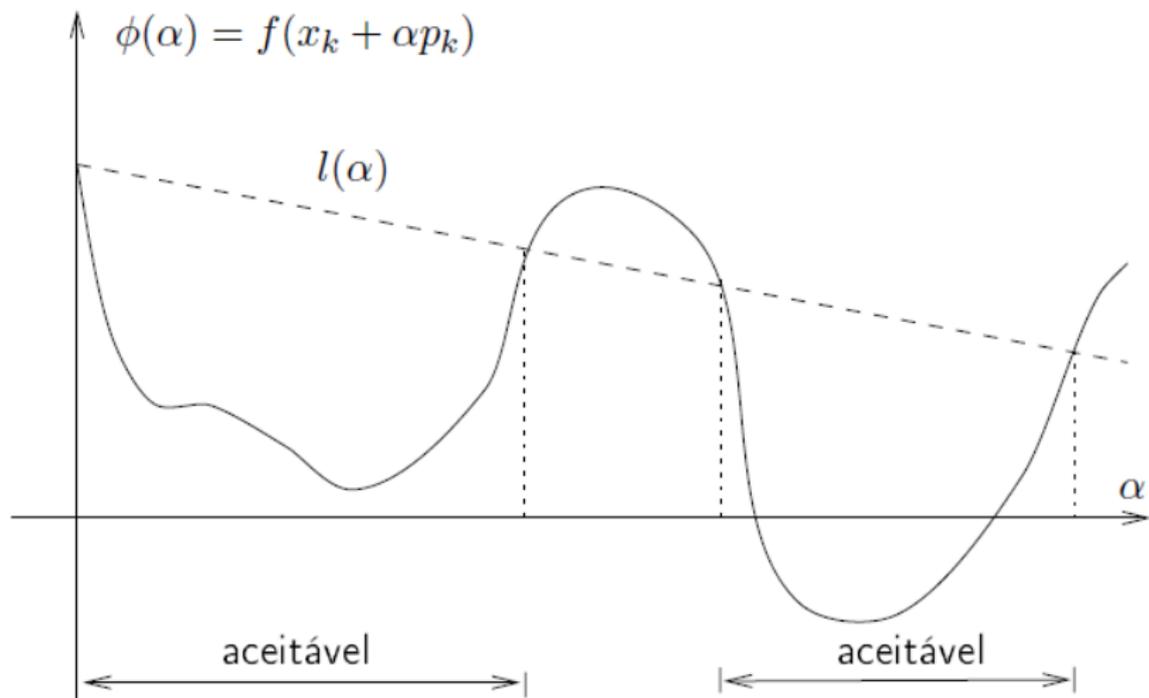


Surgem, assim, as chamadas **condições de Wolfe**.

As condições de Wolfe englobam a **condição de decréscimo suficiente (CDS)** e a **condição de curvatura (CC)**.

A CDS (também designada por condição de Armijo) é dada pela desigualdade

$$\underbrace{f(x_k + \alpha_k p_k)}_{\phi(\alpha_k)} \leq \overbrace{f(x_k) + c_1 \alpha_k \nabla f(x_k)^\top p_k}^{l(\alpha_k)} \quad c_1 \in (0, 1)$$

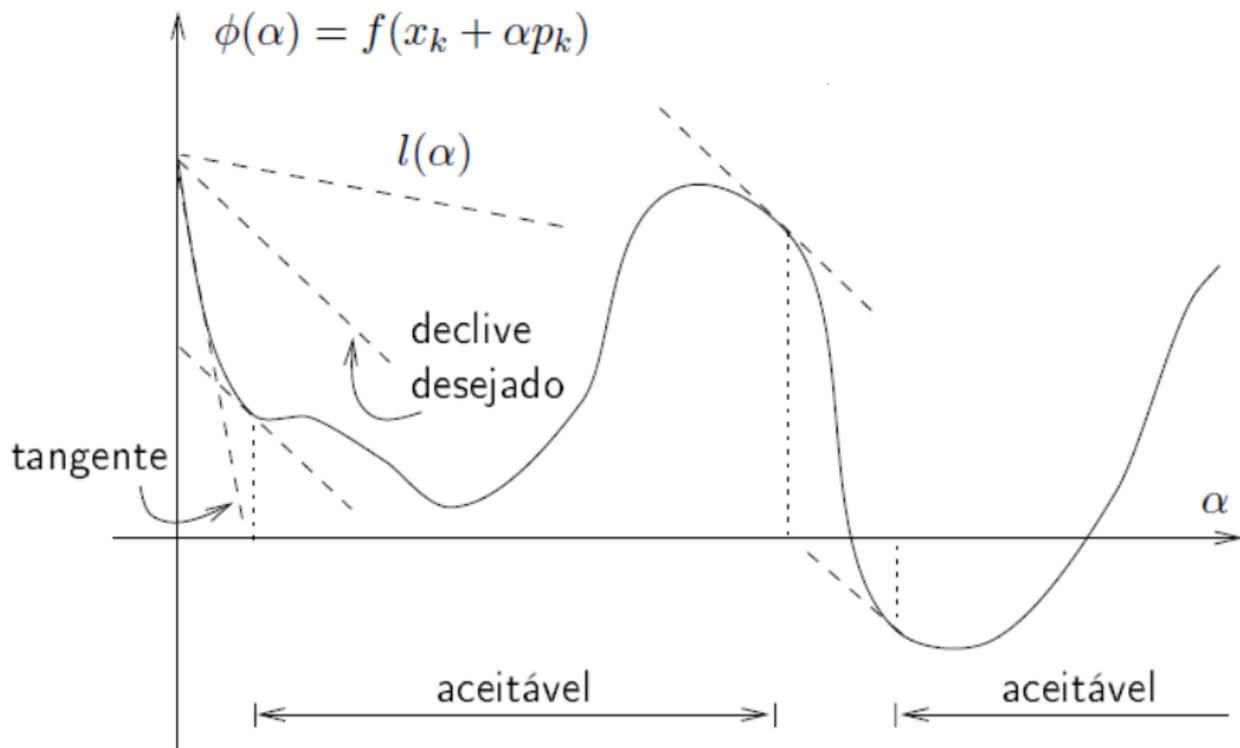


Condição de decréscimo suficiente

A CDS, por si só, não elimina os problemas da redução simples.

Surge assim a CC

$$\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^\top p_k \geq c_2 \nabla f(x_k)^\top p_k \iff \phi'(\alpha_k) \geq c_2 \phi'(0) \quad c_2 \in (c_1, 1)$$



Condição de curvatura

Lema

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável.

Seja p_k uma direcção de descida em x_k e f limitada inferiormente ao longo da semi-recta $\{x_k + \alpha p_k \mid \alpha > 0\}$.

Então, se $0 < c_1 < c_2 < 1$, existem intervalos de comprimentos de passo satisfazendo as condições de Wolfe.

Demonstração: $\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$ é limitada inferiormente.

Uma vez que $0 < c_1 < 1$, $l(\alpha) = f(x_k) + \alpha c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k$ tende para $-\infty$ com quando $\alpha \rightarrow +\infty$.

Por isso intersecta ϕ pelo menos uma vez.

Seja α' o menor valor de α dessa intersecção, assim

$$f(x_k + \alpha' p_k) = f(x_k) + \alpha' c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k$$

Logo a CDS é válida $\forall \alpha < \alpha'$.

Pelo teorema do valor médio

$$\exists \alpha'' \in (0, \alpha') : f(x_k + \alpha' p_k) - f(x_k) = \alpha' \nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^\top p_k$$

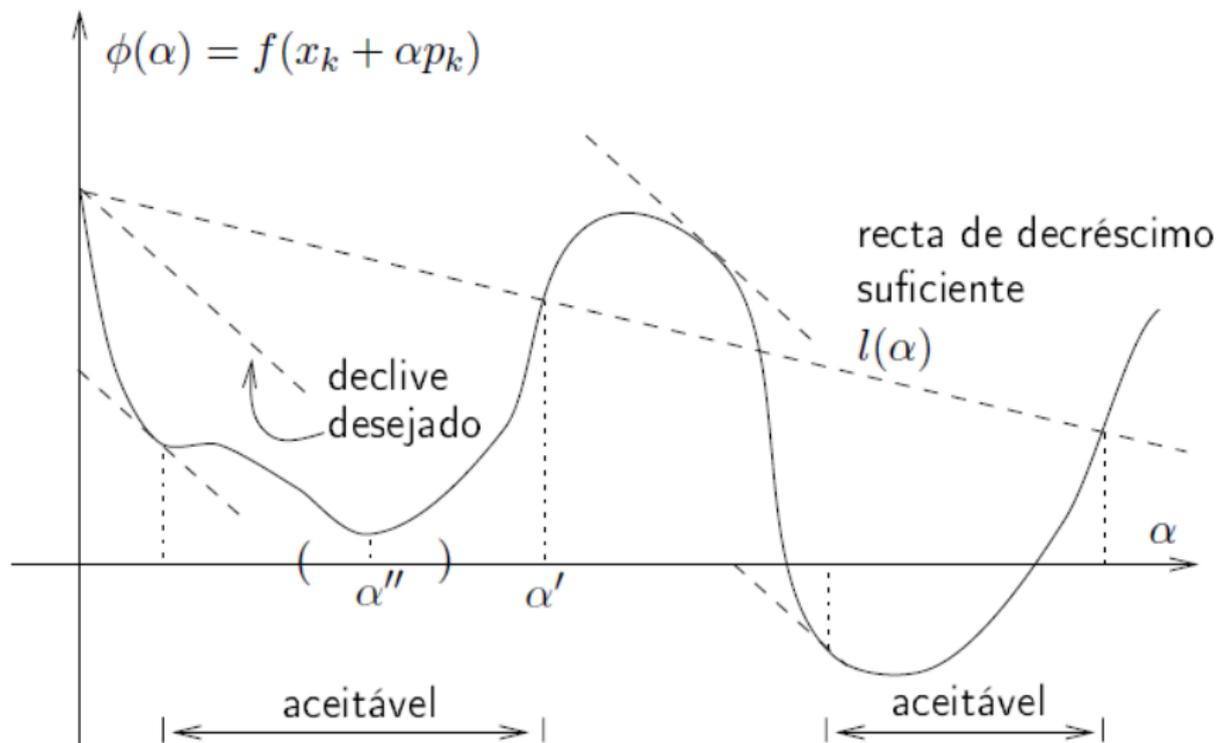
Tendo em conta as duas últimas equações, vem

$$\nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^\top p_k = c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k$$

Uma vez que $c_1 < c_2$ e $\nabla f(x_k)^\top p_k < 0$, vem

$$\nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^\top p_k = c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k > c_2 \nabla f(x_k)^\top p_k$$

Assim, α'' satisfaz as condições de Wolfe e pelo facto de ∇f ser contínuo, existe um intervalo em torno de α'' onde as condições de Wolfe são válidas. ■



Intervalos de comprimentos de passo satisfazendo as condições de Wolfe

Notas:

- α pode satisfazer as condições de Wolfe (CDS+CC) e não ser ponto estacionário, minimizante local ou global de ϕ .
- As condições de Wolfe são invariantes ao escalonamento.

Definição

$$\cos \theta_k = \frac{-\nabla f(x_k)^\top p_k}{\|\nabla f(x_k)\| \|p_k\|}$$

Teorema

Considere-se $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$, em que $\nabla f(x_k)^\top p_k < 0$ e α_k satisfaz as condições de Wolfe.

Suponhamos que ∇f é contínuo à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) num aberto contendo o conjunto de nível $L(x_0) = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$.

Suponhamos, ainda, que f é limitada inferiormente em $L(x_0)$. Então

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x_k)\|^2 < \infty$$

Demonstração: Pela CDS, temos

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + (c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k) \alpha_k$$

Necessitamos de um limite inferior para α_k (como nos métodos de procura directa).

Pela CC,

$$(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k))^\top p_k \geq (c_2 - 1) \nabla f(x_k)^\top p_k$$

$$\implies (c_2 - 1) \nabla f(x_k)^\top p_k \leq \nu \alpha_k \|p_k\|^2$$

$$\implies \frac{1 - c_2}{\nu} \frac{\nabla f(x_k)^\top p_k}{\|p_k\|^2} \geq -\alpha_k$$

Temos,

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + (c_1 \nabla f(x_k)^\top p_k) \alpha_k$$

e

$$\frac{1 - c_2}{\nu} \frac{\nabla f(x_k)^\top p_k}{\|p_k\|^2} \geq -\alpha_k$$

Logo,

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq f(x_k) - \underbrace{c_1 \frac{1 - c_2}{\nu}}_{\equiv c} \frac{(\nabla f(x_k)^\top p_k)^2}{\|p_k\|^2} \\ &= f(x_k) - c \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x_k)\|^2 \end{aligned}$$

Assim,

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_0) - c \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|\nabla f(x_j)\|^2$$

Tendo em conta que f é limitada inferiormente em $L(x_0)$ (e seja f^* um tal limite inferior), vem

$$c \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|\nabla f(x_j)\|^2 \leq f(x_0) - f(x_{k+1}) \leq f(x_0) - f^*$$

$$\implies \left\{ \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|\nabla f(x_j)\|^2 \right\} \text{ é uma sucessão convergente}$$

(pois é crescente e limitada superiormente). ■

Do teorema anterior, resulta que

$$\cos^2 \theta_k \|\nabla f(x_k)\|^2 \longrightarrow 0$$

Logo,

$$\text{se } \exists \delta : \cos \theta_k \geq \delta > 0 \quad \forall k$$

então,

$$\cos^2 \theta_k \|\nabla f(x_k)\|^2 \longrightarrow 0 \quad \iff \quad \nabla f(x_k) \longrightarrow 0$$

Suponhamos que x_* é um ponto de acumulação.

Logo,

$$\exists K : \lim_{k \in K} x_k = x_*$$

Então

$$0 = \lim_{k \in K} \nabla f(x_k) = \nabla f \left(\lim_{k \in K} x_k \right) = \nabla f(x_*)$$

ou seja, todos os pontos de acumulação de $\{x_k\}$ são estacionários.

Exercício:

- Prove que

$$\text{se } p_k = -B_k^{-1}\nabla f(x_k)$$

com B_k SPD (simétrica e definida positiva) e $\text{cond}(B_k) \leq M$, então

$$\cos \theta_k \geq \frac{1}{M}$$

- 1 Métodos numéricos para optimização não linear sem restrições
 - Métodos de procura directa
 - Métodos de procura unidireccional (geral)
 - Métodos de procura unidireccional (descida máxima, Newton)
 - Métodos de região de confiança
- 2 Teoria da optimização não linear com restrições
 - Introdução e qualificações de restrições
 - Condições de primeira ordem
 - Condições de segunda ordem
 - Teoria da dualidade
- 3 Métodos numéricos para optimização não linear com restrições
 - Método da penalização quadrática
 - Método do Lagrangeano aumentado
 - Programação Sequencial Quadrática (SQP)
 - Métodos de pontos interiores

Do último teorema resulta que o método da descida máxima ($p_k = -\nabla f(x_k)$) com condições de Wolfe é **globalmente convergente**.

Da demonstração do último teorema resulta, também, um resultado de complexidade, no pior dos casos, para o método da descida máxima (MDM).

Dado um $\varepsilon \in (0, 1)$, quantas iterações são necessárias para alcançar $\|\nabla f(x_N)\| \leq \varepsilon$?

Seja

$$\delta_N^* = \min_{0 \leq j \leq N} \|\nabla f(x_j)\|$$

Fazendo $k = N$, da demonstração anterior, temos que

$$c \sum_{j=0}^N \cos^2 \theta_j \|\nabla f(x_j)\|^2 \leq f_0 - f^*$$

com f^* limite inferior para f em $L(x_0)$.

Temos, assim, que

$$\begin{aligned} c(N+1)(\delta_N^*)^2 &\leq c \sum_{j=0}^N \|\nabla f(x_j)\|^2 \stackrel{\text{MDM}}{=} c \sum_{j=0}^N \cos^2 \theta_j \|\nabla f(x_j)\|^2 \\ &\leq f_0 - f^* \end{aligned}$$

Logo,

$$\delta_N^* \leq \left(\frac{f_0 - f^*}{c(N+1)} \right)^{1/2}$$

(Daqui resulta uma taxa sublinear de decréscimo para o gradiente.)

Assim,

$$\text{se } N + 1 \geq \frac{(f_0 - f^*)}{c\varepsilon^2}, \quad \text{vem que } \delta_N^* \leq \varepsilon.$$

Logo, no máximo são precisas $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$ iterações para o MDM atingir um gradiente em norma inferior a ε .

Este resultado de complexidade no pior dos casos é alcançável — ou seja, é possível encontrar um exemplo em que tal acontece.

Definições de taxas de convergência

Seja $\{w_k\}$ uma sucessão a convergir para w_* . A sucessão diz-se que converge:

Sublinearmente quando $\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|w_{k+1} - w_*\|}{\|w_k - w_*\|} = 1$.

Linearmente quando existe $r \in (0, 1)$ tal que $\frac{\|w_{k+1} - w_*\|}{\|w_k - w_*\|} \leq r$ para todo o k (ou k suficientemente grande).

Superlinearmente quando $\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|w_{k+1} - w_*\|}{\|w_k - w_*\|} = 0$.

Quadraticamente quando existe $M > 0$ tal que $\frac{\|w_{k+1} - w_*\|}{\|w_k - w_*\|^2} \leq M$ para todo o k (ou k suficientemente grande).

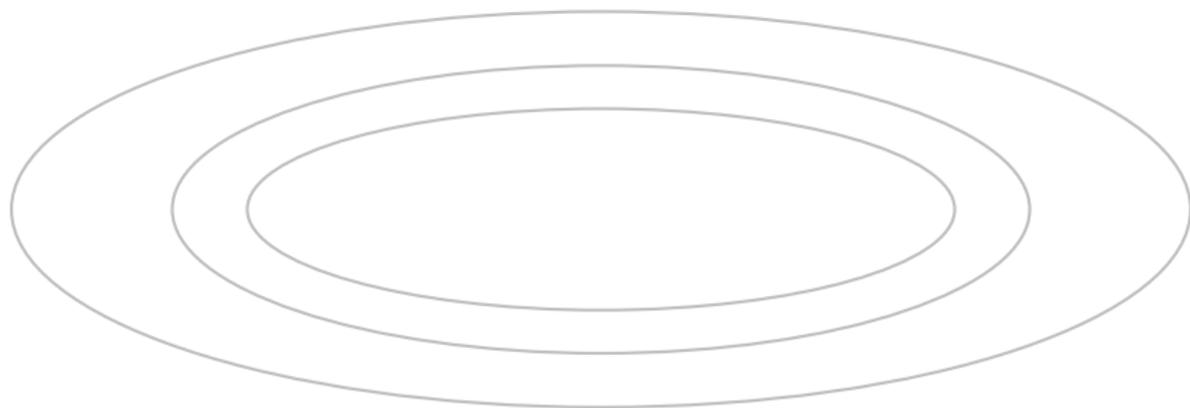
Qual é a taxa de convergência local do MDM?

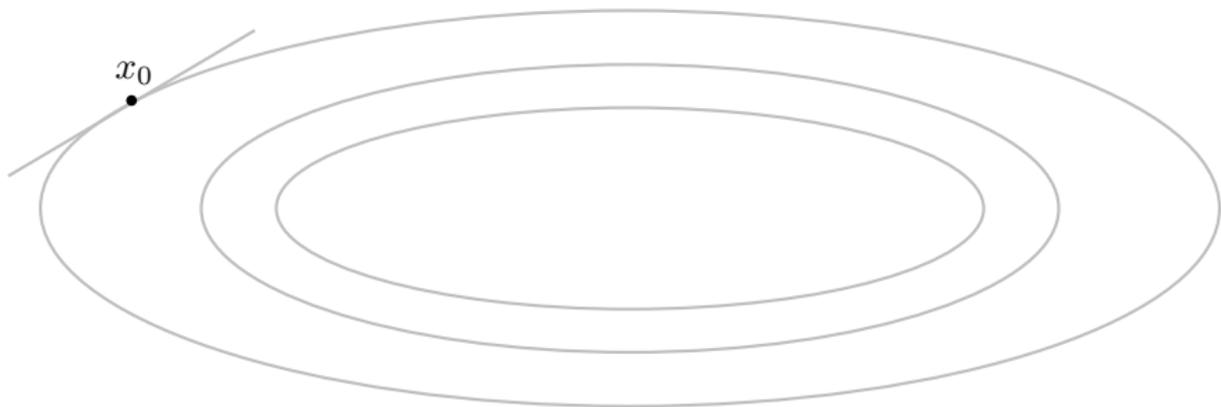
É **linear**. Primeiro vejamos o caso quadrático estritamente convexo:

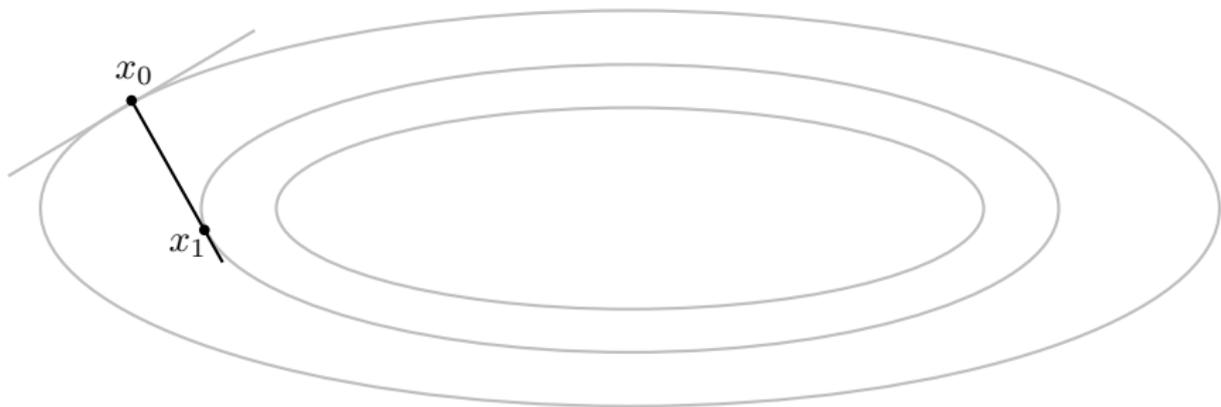
$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x \quad \text{com } Q \text{ SPD.}$$

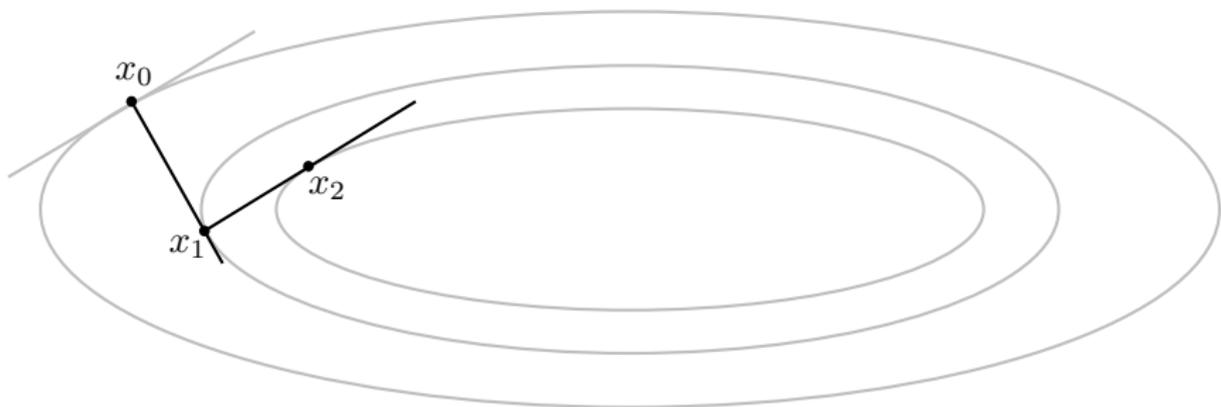
O MDM com procura unidireccional exacta é dado por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\nabla f(x_k)^\top \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^\top Q \nabla f(x_k)} \underbrace{\nabla f(x_k)}_{= Qx_k - b}$$









Teorema

Quando o MDM com procura unidireccional exacta é aplicado a uma função quadrática estritamente convexa, o erro absoluto satisfaz

$$\|x_{k+1} - x_*\|_Q \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} \right) \|x_k - x_*\|_Q$$

em que

$$\|y\|_Q = \sqrt{y^\top Q y}$$

e

$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os valores próprios de Q .

Notas:

- As iteradas convergem linearmente.
- O melhor caso é quando $\lambda_1 = \dots = \lambda_n = \lambda$ e $Q = \lambda I$.

- A constante

$$\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} = \frac{\lambda_n/\lambda_1 - 1}{\lambda_n/\lambda_1 + 1}$$

é tanto maior quanto maior for $\text{cond}(Q) = \lambda_n/\lambda_1$.

Quando q é uma função quadrática convexa, vem também que

$$q(x) - q(x_*) = \frac{1}{2}(x - x_*)^\top Q(x - x_*) = \frac{1}{2}\|x - x_*\|_Q^2$$

Logo viria, $q(x_{k+1}) - q(x_*) \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2 (q(x_k) - q(x_*))$.

Quando f for uma função não linear e $\nabla^2 f(x_*)$ for PD, f pode ser aproximada em torno de x_* por uma função quadrática estritamente convexa.

Logo, a menos de um erro (que sabemos que é cúbico), é natural que tenhamos um caso semelhante para o caso não linear (MDM com procura unidireccional exacta), mas agora medido em termos de f .

Teorema

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes continuamente diferenciável.

Seja $\{x_k\}$ tal que $x_k \rightarrow x_*$. Suponha que $\nabla f(x_*) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*)$ é PD.

Seja

$$r \in \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}, 1 \right)$$

em que $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ são os valores próprios de $\nabla^2 f(x_*)$.

Então, para k suf. grande,

$$f(x_{k+1}) - f(x_*) \leq r^2[f(x_k) - f(x_*)]$$

O que é o método de Newton para $\min f(x)$ com $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$?

É o método de Newton aplicado a $\nabla f(x) = 0$ com $\nabla f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Pondo $F = \nabla f$ em $x_{k+1} = x_k + (J_F(x_k))^{-1} F(x_k)$, em que $J_F(x_k)$ é a matriz Jacobiana de F em x_k , vem que

$$J_F \underset{F=\nabla f}{=} \nabla^2 f$$

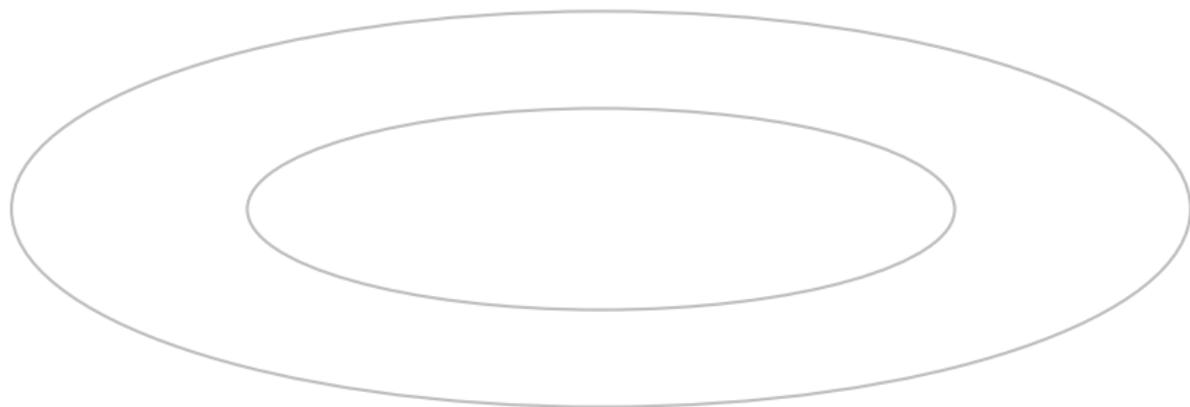
e

$$x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

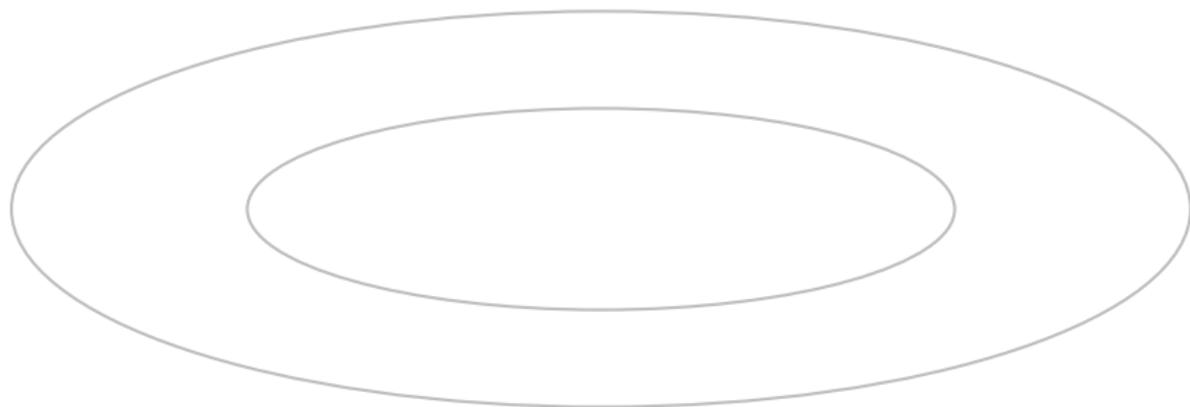
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

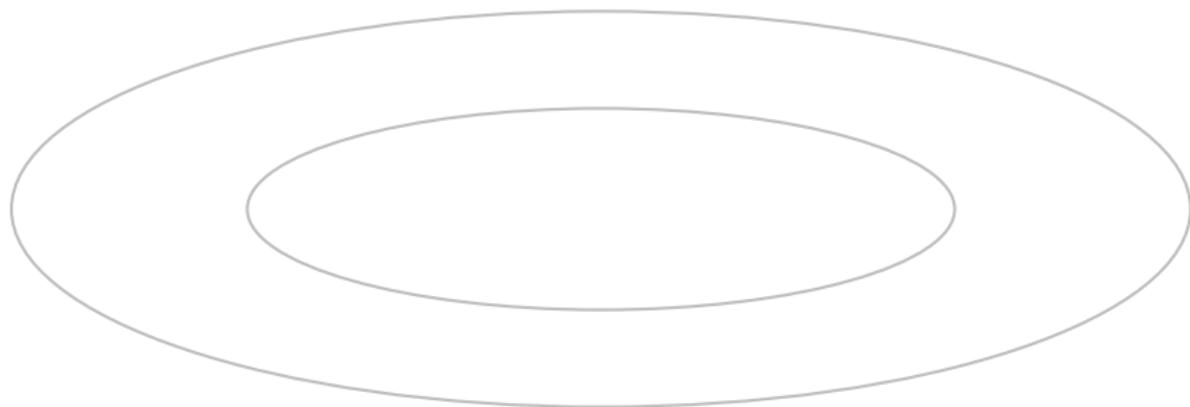
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

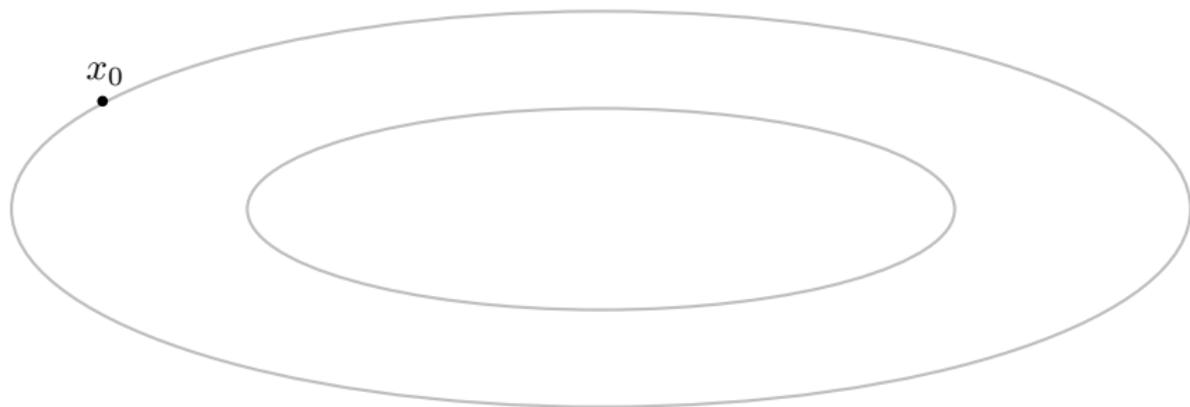
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

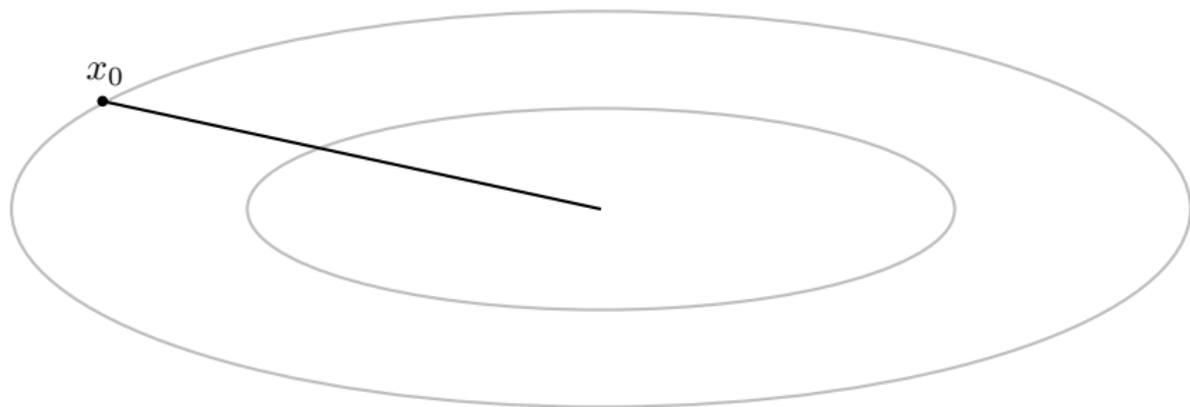
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

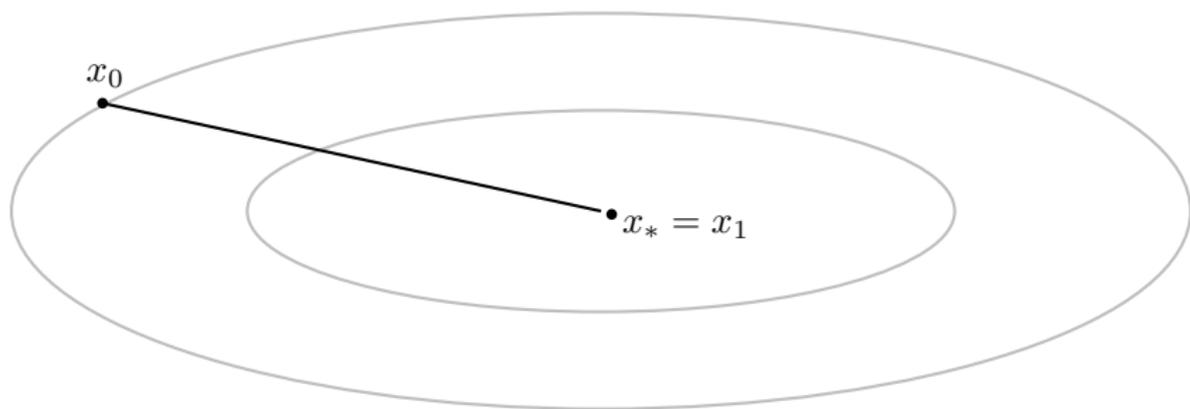
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Quando $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Qx - b^\top x$, com Q simétrica e PD

$$x_1 = x_0 - Q^{-1}(Qx_0 - b) = Q^{-1}b$$

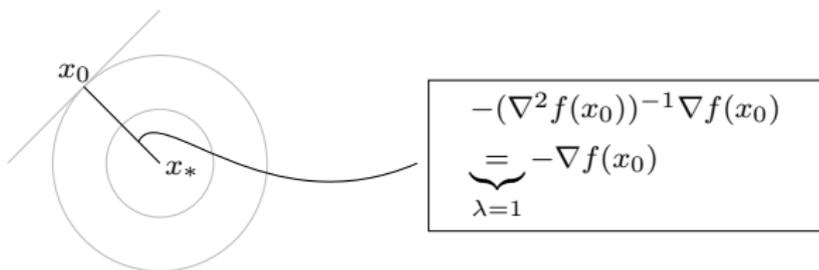
e tem-se $\nabla f(x_1) = Q(Q^{-1}b) - b = 0$, ou seja, o método de Newton converge numa iteração:



Aliás, veja-se que no caso $Q = \lambda I$

$-\nabla f(x_0)$ e $-(\nabla^2 f(x_0))^{-1}\nabla f(x_0)$ são colineares.

$$\begin{array}{ccc} \parallel & & \parallel \\ -(Qx_0 - b) & & -Q^{-1}(Qx_0 - b) \\ \parallel & & \parallel \\ -\lambda x_0 + b & & -x_0 + Q^{-1}b \\ & & \parallel \\ & & -x_0 + \frac{1}{\lambda}b \end{array}$$



Analisemos agora a taxa de convergência local do método de Newton e dos métodos de quasi-Newton.

Taxa de convergência local do método de Newton:

Teorema

Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável tal que $\nabla^2 f(x)$ é contínua à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) numa vizinhança de um ponto x_ .*

Suponhamos que $\nabla f(x_) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*)$ é PD.*

Seja $x_{k+1} = x_k + p_k$, com $p_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$. Então

(i) *Se x_0 está suficientemente próximo de x_* , $\{x_k\}$ converge para x_* .*

(ii) *A taxa de convergência é quadrática*

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq \nu \|(\nabla^2 f(x_*))^{-1}\| \|x_k - x_*\|^2$$

(iii) *$\{\|\nabla f(x_k)\|\}$ converge quadraticamente para zero.*

Exercício:

- Considere f nas condições da convergência local do método de Newton

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k + p_k \\ \|r_k\| &\leq \eta_k \|\nabla f(x_k)\| \\ r_k &= \nabla^2 f(x_k) p_k + \nabla f(x_k) \\ \eta_k &\in [0, 1)\end{aligned}$$

Prove que

- Se x_0 está suficientemente próximo de x_* e $\eta_k \leq \eta \forall k$ para $\eta \in (0, 1)$ suficientemente pequeno $\implies \{x_k\}$ converge para x_* linearmente.
- Se x_0 está suficientemente próximo de x_* e $\{\eta_k\}$ tende para 0 $\implies \{x_k\}$ converge para x_* superlinearmente.
- Se x_0 está suficientemente próximo de x_* e $\eta_k = \mathcal{O}(\|\nabla f(x_k)\|) \forall k$ $\implies \{x_k\}$ converge para x_* quadraticamente.

Taxa de convergência local dos métodos de quasi-Newton:

Teorema

Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável tal que $\nabla^2 f(x)$ é contínua à Lipschitz numa vizinhança de um ponto x_* .

Seja $x_{k+1} = x_k + p_k$, em que $p_k = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$ (B_k é SPD).

Suponhamos que $\{x_k\}$ converge para x_* e que $\nabla f(x_*) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*)$ é PD.

Então, $x_k \rightarrow x_*$ superlinearmente se e só se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x_k))p_k\|}{\|p_k\|} = 0$$

Demonstração: (provemos apenas a condição suficiente)

Veja-se que

$$\begin{aligned} p_k - p_k^N &= (\nabla^2 f(x_k))^{-1}(\nabla^2 f(x_k)p_k + \nabla f(x_k)) \\ &= (\nabla^2 f(x_k))^{-1}(\nabla^2 f(x_k) - B_k)p_k \end{aligned}$$

Então

$$\frac{\|p_k - p_k^N\|}{\|p_k\|} \leq \|(\nabla^2 f(x_k))^{-1}\| \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x_k))p_k\|}{\|p_k\|}$$

Se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x_k))p_k\|}{\|p_k\|} = 0 \quad \text{se verificar}$$

e tendo em conta que $\nabla^2 f(x_*)$ é PD, sendo por isso $\|(\nabla^2 f(x_k))^{-1}\|$ limitada, temos

$$\frac{\|p_k - p_k^N\|}{\|p_k\|} \leq \overbrace{\|(\nabla^2 f(x_k))^{-1}\|}^{\text{limitada}} \underbrace{\frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x_k))p_k\|}{\|p_k\|}}_{\text{converge para 0}}$$

Ou seja, $\|p_k - p_k^N\| = o(\|p_k\|)$.

Do teorema anterior, sabemos que para $\nu > 0$ temos

$$\|x_k + p_k^N - x_*\| \leq \nu \|(\nabla^2 f(x_*))^{-1}\| \|x_k - x_*\|^2$$

Fazendo $\varepsilon = \nu \|(\nabla^2 f(x_*))^{-1}\| > 0$, vem

$$\|x_k + p_k^N - x_*\| \leq \varepsilon \|x_k - x_*\|^2$$

Ou seja,

$$\|x_k + p_k^N - x_*\| = \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|^2)$$

Assim, temos

$$\|x_k + p_k - x_*\| \leq \|x_k + p_k^N - x_*\| + \|p_k - p_k^N\| = \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|^2) + o(\|p_k\|)$$

Por outro lado, temos

$$\|p_k\| \leq \|x_k + p_k - x_*\| + \|x_k - x_*\| = o(\|p_k\|) + \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|)$$

Como $o(\|p_k\|) = \epsilon_k \|p_k\|$, com $\epsilon_k \rightarrow 0$, vem que, para k suf. grande tal que $\epsilon_k \leq 1/2$,

$$\|p_k\| \leq o(\|p_k\|) + \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|) \leq \frac{1}{2} \|p_k\| + \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|)$$

o que implica $\|p_k\| = \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|)$.

Recapitulando, chegámos a

$$\|x_k + p_k - x_*\| \leq \mathcal{O}(\|x_k - x_*\|^2) + o(\|p_k\|)$$

em que

$$\mathcal{O}(\|x_k - x_*\|^2) = o(\|x_k - x_*\|)$$

e que

$$o(\|p_k\|) = o(\mathcal{O}(\|x_k - x_*\|)) = o(\|x_k - x_*\|)$$



Teorema

Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável tal que $\nabla^2 f(x)$ é contínua à Lipschitz numa vizinhança de um ponto x_* .

Seja $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$, em que p_k é uma direcção de descida e α_k satisfaz as condições de Wolfe com $c_1 \leq 1/2$.

Suponhamos que $\{x_k\}$ converge para x_* e que $\nabla f(x_*) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*)$ é PD.

Se a direcção de procura satisfizer

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\|\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k) p_k\|}{\|p_k\|} = 0$$

então

- (i) $\alpha_k = 1$ satisfaz as condições de Wolfe para k suf. grande.
- (ii) Se testarmos sempre $\alpha_k = 1$ na procura unidireccional, então $x_k \rightarrow x_*$ superlinearmente.

Nota:

- Se $c_1 > 1/2$, a procura unidireccional excluiria o minimizante de uma quadrática $\phi(\cdot)$.

Pelo facto de $\nabla^2 f(x_k)$ poder não ser positiva definida (PD), a direcção de Newton p_k^N pode não ser de descida.

Muitas vezes, na prática, o que se implementa é o método de Newton modificado (ou com Hessiana modificada).

Algoritmo

Inicialização

Dado x_0 .

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

① Fazer $B_k = \nabla^2 f(x_k) + E_k$, em que

$$E_k = \begin{cases} 0 & \text{se } \nabla^2 f(x_k) \text{ é PD,} \\ \text{tal que } B_k \text{ seja PD} & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

② Resolver $B_k p_k = -\nabla f(x_k)$.

③ Fazer $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$, com α_k a satisfazer, e.g., as condições de Wolfe.

Convergência global: como

$$-\nabla f(x_k)^\top p_k = \nabla f(x_k)^\top B_k^{-1} \nabla f(x_k) > 0$$

(ou seja p_k é direcção de descida), a convergência global é garantida se

$$\exists M > 0 : \text{cond}(B_k) \leq M$$

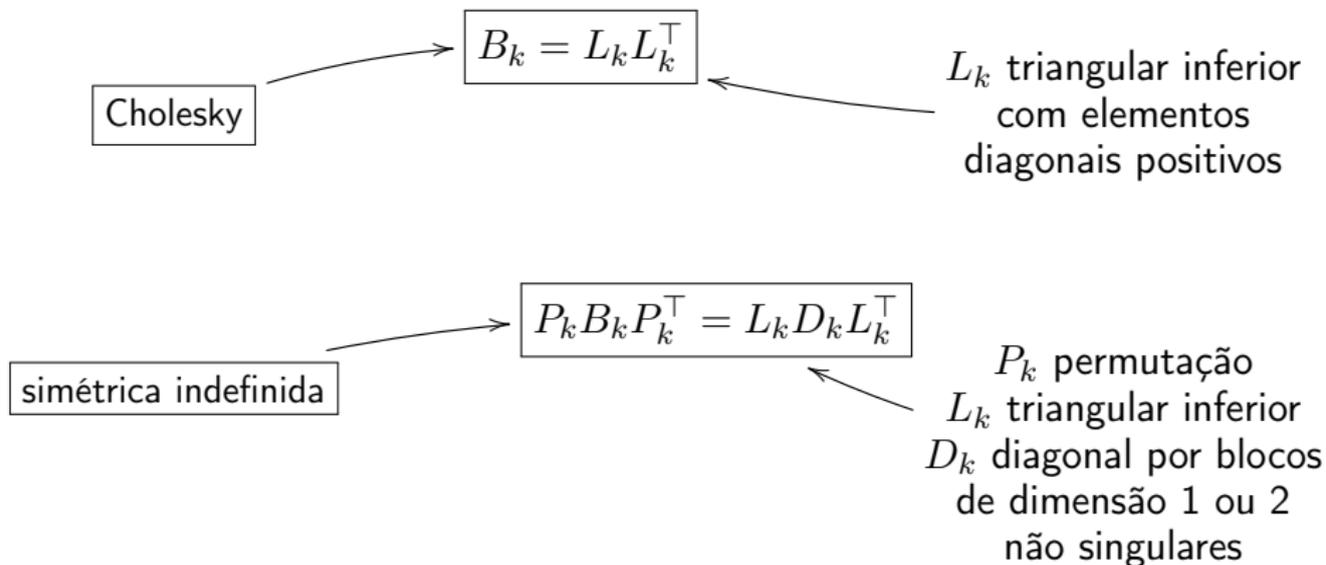
Convergência local: Considere-se

- $x_k \longrightarrow x_*$
- $\nabla^2 f(x_*)$ suficientemente PD, no sentido em que $E_k = 0$ para k suf. grande
- $c_1 \leq 1/2$

$\implies \alpha_k = 1$ para k suf. grande e logo a taxa de convergência local é quadrática.

As estratégias mais populares para determinar E_k não a calculam explicitamente.

Calculam os factores de uma decomposição (Cholesky ou simétrica indefinida) de (uma versão modificada de) $\nabla^2 f(x_k)$.



Exercício:

- Aplique o Método de Newton e o Método BFGS, ambos com a CDS, à função de Rosenbrock

$$100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2$$

Constata a convergência local obtida traçando $\|x_k - x_*\|$ (talvez numa escala logaritmica).

- 1 Métodos numéricos para optimização não linear sem restrições
 - Métodos de procura directa
 - Métodos de procura unidireccional (geral)
 - Métodos de procura unidireccional (descida máxima, Newton)
 - Métodos de região de confiança
- 2 Teoria da optimização não linear com restrições
 - Introdução e qualificações de restrições
 - Condições de primeira ordem
 - Condições de segunda ordem
 - Teoria da dualidade
- 3 Métodos numéricos para optimização não linear com restrições
 - Método da penalização quadrática
 - Método do Lagrangeano aumentado
 - Programação Sequencial Quadrática (SQP)
 - Métodos de pontos interiores

Considere-se uma aproximação quadrática de f centrada em x_k

$$m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^\top p + \frac{1}{2} p^\top B_k p$$

em que B_k é uma matriz simétrica que corresponde a uma aproximação de $\nabla^2 f(x_k)$.

Note-se que

$$m_k(p) - f(x_k + p) = \mathcal{O}(\|p\|^2)$$

Os métodos de região de confiança (MRC) utilizam uma aproximação p_k da solução de

$$\begin{array}{l} \min_{p \in \mathbb{R}^n} m_k(p) \\ \text{sujeito a } \|p\| \leq \Delta_k \end{array} \quad \text{PRC}_k$$

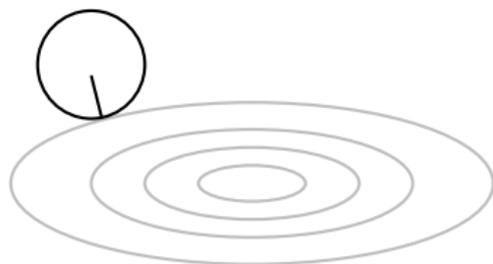
em que $\Delta_k > 0$ é o raio da região de confiança.

Nota:

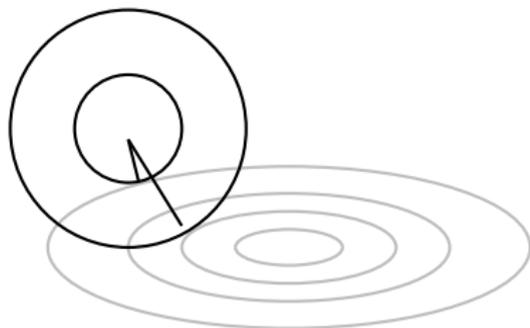
- Se B_k for PD e $\| -B_k^{-1} \nabla f(x_k) \| \leq \Delta_k$, então $p_k^B = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$ é a solução do PRC_k .



curvas de nível de $m_k(p)$

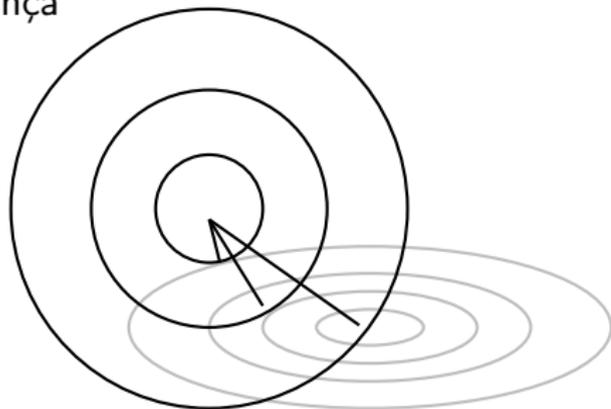


curvas de nível de $m_k(p)$



curvas de nível de $m_k(p)$

regiões de confiança



curvas de nível de $m_k(p)$

Algoritmo (MRC)

Inicialização

Escolher $\alpha, \eta \in (0, 1)$, x_0 e $\Delta_0 > 0$.

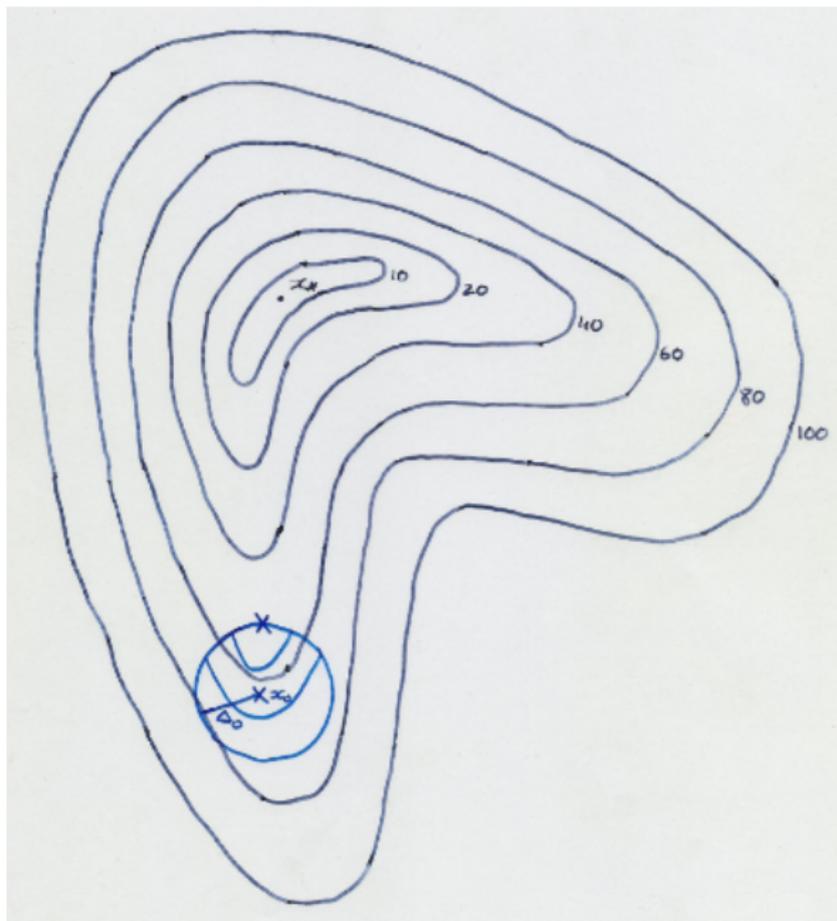
Para $k = 0, 1, 2, \dots$

- 1 Obter p_k resolvendo PRC_k “aproximadamente”.
- 2 Calcular

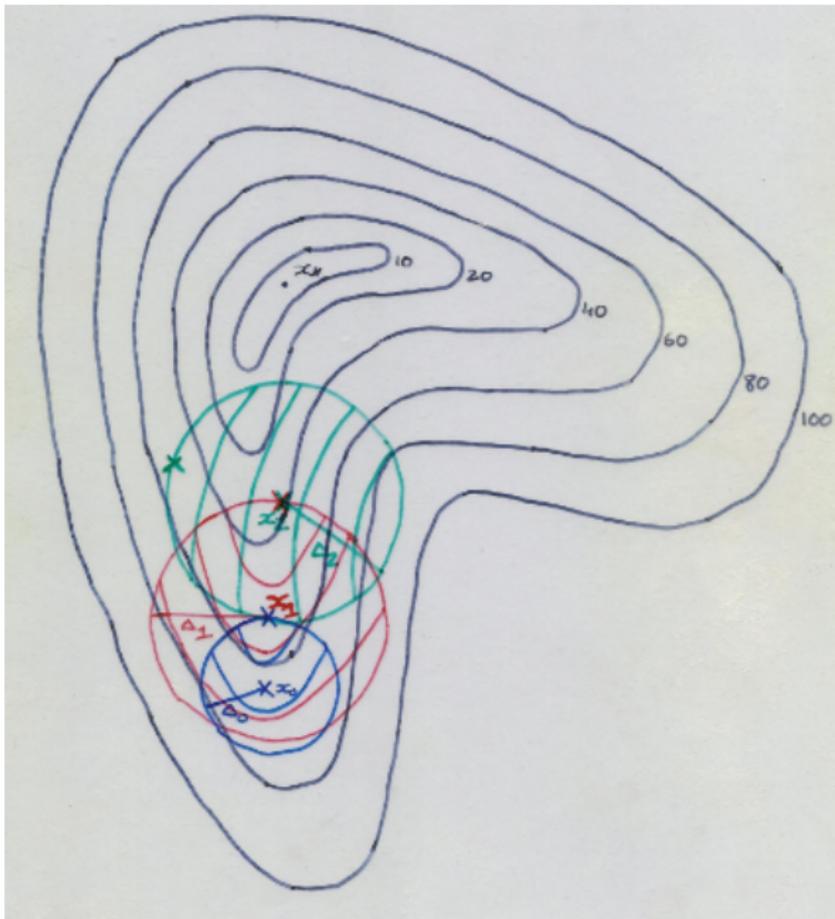
$$\rho_k = \frac{\overbrace{f(x_k) - f(x_k + p_k)}^{\text{redução actual}}}{\underbrace{m_k(0) - m_k(p_k)}_{\text{redução prevista}}}$$

- 3 Se $\rho_k \geq \eta$ fazer $x_{k+1} = x_k + p_k$ e $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$.
Caso contrário $x_{k+1} = x_k$ e $\Delta_{k+1} = \alpha \Delta_k$.











Notas:

- Supõe-se sempre que $m_k(0) - m_k(p_k) > 0$ (óbvio quando p_k é a solução do PRC_k).
- Nestas condições, $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ quando $x_{k+1} \neq x_k$.

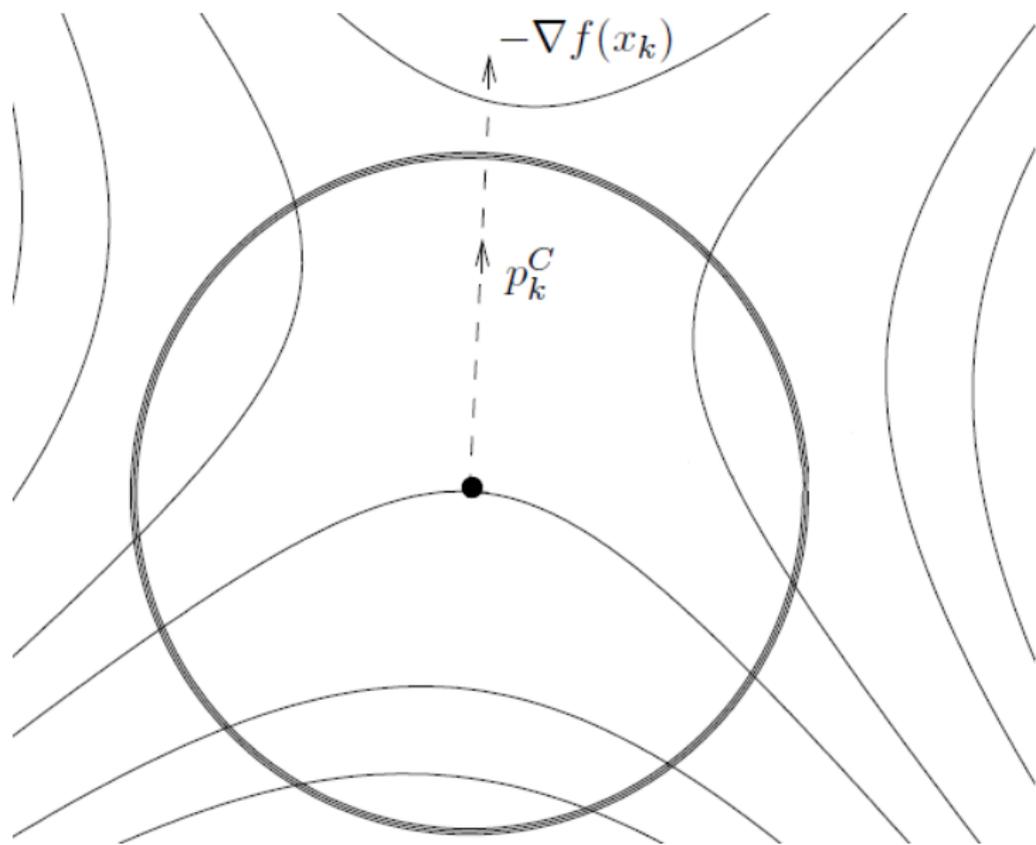
Vamos supor, para já, que p_k oferece um decréscimo em $m_k(\cdot)$ melhor do que uma fracção do decréscimo de Cauchy.

Ou seja, vamos supor que

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 (m_k(0) - m_k(p_k^C))$$

onde $c_1 \in (0, 1)$ e p_k^C denota o ponto de Cauchy, a solução de

$$\begin{aligned} & \min_{\tau \geq 0} m_k(-\tau \nabla f(x_k)) \\ & \text{sujeito a } \quad \|\tau \nabla f(x_k)\| \leq \Delta_k \end{aligned}$$



Lema

$$m_k(0) - m_k(p_k^C) \geq \frac{1}{2} \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|B_k\|} \right\}$$

Do lema anterior, temos que

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq \overbrace{\frac{1}{2} c_1}^{c_2} \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|B_k\|} \right\}$$

Hipótese (H1)

f é limitada inferiormente no conjunto de nível

$$L(x_0) = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}.$$

Hipótese (H2)

∇f é contínuo à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) num aberto contendo $L(x_0)$.

Hipótese (H3)

$$\exists \beta > 0 : \|B_k\| \leq \beta \quad \forall k$$

Lema

Supondo (H2) e (H3), temos

$$|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| \leq \left(\frac{\beta + \nu}{2}\right) \|p_k\|^2$$

Lema

Supondo (H2), (H3) e $\nabla f(x_k) \neq 0$

$$\text{se } \Delta_k \leq c_3 \|\nabla f(x_k)\|, \quad \text{então}$$

a iteração k tem sucesso.

Demonstração:

$$\begin{aligned} m_k(0) - m_k(p_k) &\stackrel{\text{lema}}{\geq} c_2 \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|B_k\|} \right\} \\ &\stackrel{(H3)}{\geq} c_2 \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\beta} \right\} \\ &\geq c_2 \|\nabla f(x_k)\| \Delta_k \quad \left(\text{se } \Delta_k \leq \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\beta} \right) \end{aligned}$$

Logo,

$$|\rho_k - 1| = \frac{|f(x_k) - f(x_k + p_k) - (m_k(0) - m_k(p_k))|}{|m_k(0) - m_k(p_k)|}$$

result. ant. e lema

$$\underbrace{\leq}_{\leq} \frac{\left(\frac{\beta + \nu}{2}\right) \|p_k\|^2}{c_2 \|\nabla f(x_k)\| \Delta_k}$$

$$\leq \frac{\beta + \nu}{2} \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|}$$

$$\leq 1 - \eta \quad \left(\text{se } \Delta_k \leq \frac{c_2(1 - \eta)}{(\beta + \nu)/2} \|\nabla f(x_k)\| \right)$$

Assim, temos

$$|\rho_k - 1| \leq 1 - \eta \iff$$

$$\eta - 1 \leq \rho_k - 1 \leq 1 - \eta$$

$$\implies \rho_k - 1 \geq \eta - 1 \iff$$

$$\rho_k \geq \eta$$

A demonstração termina fazendo

$$c_3 = \min \left\{ \frac{1}{\beta}, \frac{2c_2(1-\eta)}{\beta + \nu} \right\}$$



Teorema

Supondo (H1), (H2) e (H3) temos

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$$

Demonstração: Suponhamos que

$$\exists \varepsilon > 0 : \|\nabla f(x_k)\| \geq \varepsilon \quad \forall k$$

Suponhamos também que existe um número infinito de iterações com sucesso.

Consideremos uma iteração com sucesso

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(\underbrace{x_k + p_k}_{x_{k+1}}) &\geq c_2 \|\nabla f(x_k)\| \min \left\{ \Delta_k, \frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\beta} \right\} \\ &\geq c_2 \varepsilon \min \left\{ c_4, \frac{\varepsilon}{\beta} \right\} \quad (\text{ver lema a seguir}) \end{aligned}$$

Somando todas as iterações, com sucesso, de 0 até k , vem

$$\begin{aligned} f(x_0) - f(x_{k+1}) &\geq \sum_{\substack{j=0 \\ j \text{ com sucesso}}}^k f(x_j) - f(x_{j+1}) \\ &\geq \underbrace{|S_k|}_{\downarrow +\infty} \left(c_2 \varepsilon \min \left\{ c_4, \frac{\varepsilon}{\beta} \right\} \right) \end{aligned}$$

onde $S_k = \{i \text{ com sucesso de } 0 \text{ a } k\}$.

Assim,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} f(x_0) - f(x_{k+1}) = +\infty$$

o que contraria o facto de f ser limitada inferiormente (H1).

Se o número de iterações com sucesso for finito

$$\exists \bar{k} : x_k = x_{\bar{k}}, \quad \nabla f(x_k) = \nabla f(x_{\bar{k}}) \quad \forall k \geq \bar{k} \quad \text{e} \quad \Delta_k \rightarrow 0$$

mas isso contradiz o lema anterior.



Lema

Supondo (H2), (H3) e $\nabla f(x_k) \neq 0$

se $\|\nabla f(x_k)\| \geq \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) $\forall k$, então $\exists c_4 > 0 : \Delta_k \geq c_4 \forall k$.

Demonstração: Suponhamos que k é a primeira iteração tal que

$$\Delta_{k+1} \leq \alpha c_3 \varepsilon$$

Nesse caso, como $\alpha \Delta_k \leq \Delta_{k+1}$ então

$$\Delta_k \leq \frac{1}{\alpha} \alpha c_3 \varepsilon \leq c_3 \|\nabla f(x_k)\|$$

e, aplicando o lema precedente, $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$ e isso contradiz o facto de Δ_k ser a primeira iteração tal que $\Delta_{k+1} \leq \alpha c_3 \varepsilon$ acontece. ■

É possível provar, nas mesmas condições, que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$$

É, também, possível provar resultados deste tipo quando $\eta = 0$ (decrésimo simples), sob determinadas alterações ao algoritmo.

É, também, possível provar um resultado de convergência global para pontos estacionários de segunda ordem.

Para tal p_k tem, também, de oferecer em $m_k(\cdot)$ um decréscimo melhor do que uma fracção do decréscimo do passo do vector próprio (associado ao menor valor próprio).

Seja $\lambda_{\min}(B_k)$ o menor valor próprio de B_k .

Seja p_k^E um vector próprio associado a $\lambda_{\min}(B_k)$.

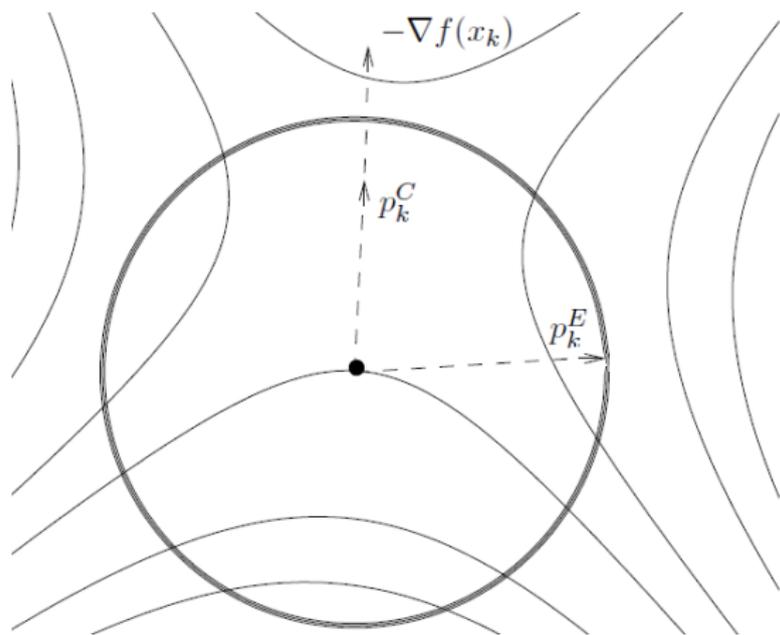
$$B_k p_k^E = \underbrace{\lambda_{\min}(B_k)}_{\text{supõe-se } < 0} p_k^E$$

Suponha-se, sem perda de generalidade, que

$$\|p_k^E\| = \Delta_k \quad \text{e} \quad (p_k^E)^\top \nabla f(x_k) < 0.$$

Pode-se provar que p_k^E é a solução óptima de

$$\begin{aligned} \min_{\tau \geq 0} \quad & m_k(\tau p_k^E) \\ \text{sujeito a} \quad & \|\tau p_k^E\| \leq \Delta_k \end{aligned}$$



Assim, quando $\lambda_{\min}(B_k) \geq 0$, supõe-se que

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1^2 (m_k(0) - m_k(p_k^C))$$

e, caso contrário,

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1^2 \max \{ m_k(0) - m_k(p_k^C), m_k(0) - m_k(p_k^E) \}$$

com $c_1^2 \in (0, 1)$.

Hipótese ($H_1^2 = H1$)

f é limitada inferiormente no conjunto de nível $L(x_0)$.

Hipótese (H_2^2)

$\nabla^2 f$ é contínua à Lipschitz (com constante $\nu > 0$) num aberto centrado em $L(x_0)$.

Hipótese (H_3^2)

$$\exists \beta^2 > 0 : \|\nabla^2 f(x_k)\| \leq \beta^2 \quad \forall k$$

Teorema

Supondo (H_1^2) , (H_2^2) , (H_3^2) , $B_k = \nabla^2 f(x_k)$ e que p_k satisfaz uma fracção do decréscimo do passo do vector próprio, temos

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \max \{ \|\nabla f(x_k)\|, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x_k)) \} = 0$$

Sob alterações ao algoritmo e nas mesmas hipóteses, pode-se alcançar “lim” em vez de “lim inf”.

O comportamento global/local dos MRC pode ser caracterizado através do seguinte resultado.

Teorema

Seja f uma função de classe C^2 em x_* e $\nabla^2 f$ contínua à Lipschitz em torno de x_* (com constante $\nu > 0$).

Seja $\nabla f(x_*) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*)$ é PD.

$x_k \rightarrow x_*$ e p_k satisfaz uma fracção do decréscimo de Cauchy.

Suponha que para k suf. grande, $B_k = \nabla^2 f(x_k)$ e $p_k = p_k^N$ quando $\|p_k^N\| \leq \Delta_k$.

Então

$$\exists \Delta^* > 0, \bar{k} : \Delta_k \geq \Delta^* \quad \forall k \geq \bar{k}.$$

Nota: O passo $p_k = p_k^N$, quando $\|p_k^N\| \leq \Delta_k$ e quando $B_k = \nabla^2 f(x_k)$ for DP, é a solução do PRC_k.

Logo, tal passo satisfaz uma fracção do decréscimo de Cauchy e não há contradição entre as hipóteses.

Demonstração: Para k suf. grande (e $\beta^* = 2\|\nabla^2 f(x_*)^{-1}\|$)

(i) $\|p_k^N\| > \Delta_k$. Neste caso tem-se,

$$\|p_k\| \leq \Delta_k < \|(\nabla^2 f(x_k))^{-1}\| \|\nabla f(x_k)\| < \beta^* \|\nabla f(x_k)\|$$

(ii) $\|p_k^N\| \leq \Delta_k$ e logo,

$$p_k = p_k^N \quad \text{e} \quad \|p_k\| \leq \beta^* \|\nabla f(x_k)\|$$

Logo,

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \frac{\|p_k\|}{\beta^*} \min \left\{ \|p_k\|, \frac{\|p_k\|}{\beta^* \beta} \right\}$$

e, usando um argumento já conhecido,

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\frac{\nu}{6} \|p_k\|^3}{\frac{c_2}{\beta^*} \min \left\{ 1, \frac{1}{\beta^* \beta} \right\} \|p_k\|^2} \leq c^* \Delta_k$$

Aplicando um raciocínio utilizado anteriormente conclui-se a demonstração. ■

Nota:

- Em conclusão, o passo de Newton será tomado para k suf. grande e o MRC tem, localmente, uma taxa de convergência quadrática.

- Seria possível substituir

“ $p_k = p_k^N$ quando $\|p_k^N\| \leq \Delta_k$ ”, por

“ $\|p_k - p_k^N\| = o(\|p_k^N\|)$ quando $\|p_k^N\| \leq \Delta_k$ ”,

obtendo-se uma taxa superlinear.