ALGORITMOS PARA MINIMIZAÇÃO IRRESTRITA.

"DADO UM x^k, COMO CALCULO x^{k+1}?".

UM ALGORITMO ITERATIVO INTERESSANTE GERA UMA SEQ. $\{x^k\}$ TAL QUE $\lim_{k\to\infty} \nabla f(x^k) = 0$.

x^k: "ITERANDO".

PRÁTICA: CRITÉRIO DE PARADA É $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$, PARA $\varepsilon > 0$ DADO.

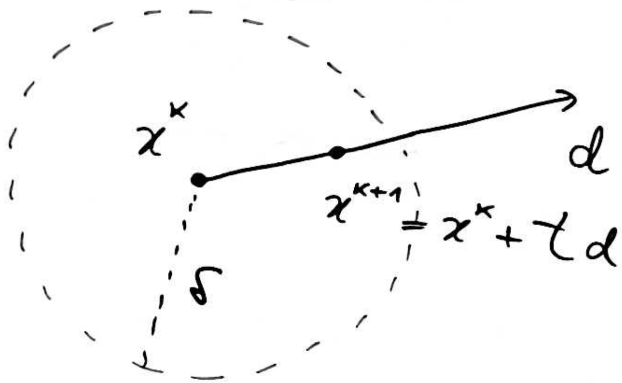
TEORIA: ACEITO QUE UM ALGORITMO "RODE INFINITAMENTE".

IDEIA BÁSICA P/ UM ALGORITMO:

A PARTIR DE x^k, OBTENHA x^{k+1} TAL QUE

$$f(x^{k+1}) < f(x^k).$$

ALGORITMOS DE DESCIDA



$$x^{k+1} = x^k + td, \quad t > 0.$$

A DIREÇÃO d É UMA <u>DIREÇÃO DE DESCIDA</u>:

f DECRESCE LOCALMENTE NA DIREÇÃO d.

DEF.: d É UMA DIREÇÃO DE DESCIDA PARA f A PARTIR DO PONTO x SE

$$f(x+td) < f(x), \quad \forall t \in (0,\delta],$$

PARA ALGUM $\delta > 0$.

ALGORITMO: DAR PASSOS EM DIREÇÕES DE DESCIDA, DIMINUINDO f !!!.

COMO CARACTERIZAR d?

TEO.: SEJA f DIFERENCIÁVEL. SE $Df(x)^t d < 0$ ENTÃO d É DIREÇÃO DE DESCIDA PARA f A PARTIR DE x.

PROVA: TEMOS

$$0 > \nabla f(x)^t d = \lim_{t \to 0^+} \frac{f(x+td) - f(x)}{t}$$

ASSIM, $f(x+td) - f(x) < 0$, $\forall t$ PEQUENO, OU SEJA, $f(x+td) < f(x)$, $\forall t$ PEQUENO. $\blacksquare$

EXEMPLOS:

1) SE $\nabla f(x) \neq 0$, ENTÃO $d = -\nabla f(x)$ É DE DESCIDA.
(MÉTODO DO GRADIENTE)

2) SE $\nabla f(x) \neq 0$ E $\nabla^2 f(x) > 0$ ENTÃO $d = -\left(\nabla^2 f(x)\right)^{-1} \nabla f(x)$ É DE DESCIDA. (MÉTODO DE NEWTON).

3) SE $\nabla f(x) \neq 0$ E B É UMA MATRIZ $m \times m$ DEF. POSITIVA, ENTÃO $d = -B\nabla f(x)$ É DE DESCIDA.

(MÉTODOS QUASE-NEWTON).

4) $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$, $\bar{x} = (1,0)$, $\hat{x} = (0,0)$

$$\nabla f = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix}.$$

- $\nabla f(\bar{x}) = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$. $\bar{d} = (-1,-1)$.

$$\nabla f(\bar{x})^t \bar{d} = [2 \quad 0]\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} = -2 < 0.$$

$\bar{d}$ É DE DESCIDA!

$\cdot\ \nabla f(\tilde{x}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$. $\qquad \tilde{d} = (0,1)$.

$$\nabla f(\tilde{x})^t \tilde{d} = 0 \ \ldots$$

$$f(\tilde{x} + t\tilde{d}) = f(0,t) = -t^2$$

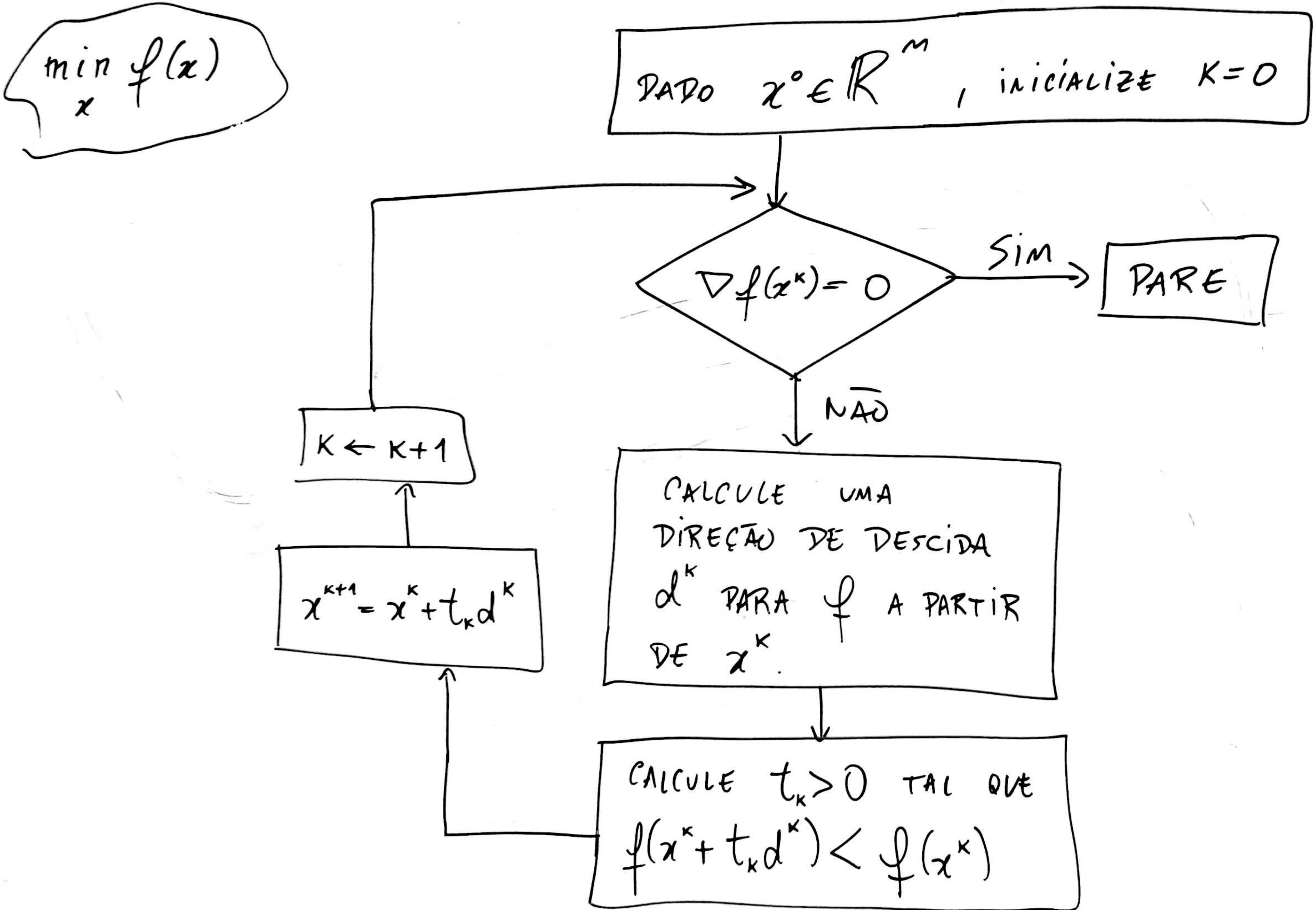
$$< 0 = f(\tilde{x})$$

$$\Downarrow$$

$\tilde{d}$ É DESCIDA ¡.

OU SEJA, A CONDIÇÃO $\nabla f(x)^t d < 0$ NÃO É NECESSÁRIA PARA QUE d SEJA DE DESCIDA (NÃO VALE A VOLTA DO TEOREMA).

ESQUEMA GENÉRICO DE UM ALGORITMO DE DESCIDA



CRITÉRIOS DE PARADA PRÁTICOS.

- $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ DADO (SUCESSO!)
- $k \geq k_{máx}$, $k_{máx} \geq 1$ (FRACASSO :( ).

OBJETIVO: TORNAR O ESQUEMA ANTERIOR "PRÁTICO".

COMO CALCULAR O TAMANHO t_k DO PASSO?

(BUSCA LINEAR).

- BUSCA EXATA: CONSISTE EM RESOLVER

$\min_{t \geq 0} f(x^k + t d^k)$. ESSE PROBLEMA NA VARIÁVEL t

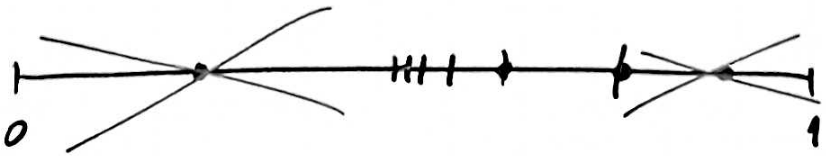
TEM SOLUÇÃO $t^* > 0$ POIS d^k É DE DESCIDA.

COMO RESOLVER?

* FÓRMULA FECHADA PARA t (DEPENDE DA SIMPLICIDADE DE f)
 - POR EXEMPLO: $f(x) = \frac{1}{2} x^t A x + b^t x$, $A > 0$.

* UTILIZAR ALGUM ALGORITMO PARA MINIMIZAÇÃO EM 1 VARIÁVEL.

(MÉTODO DA SEÇÃO ÁUREA). (t_k APROXIMADO).



- BACKTRACKING

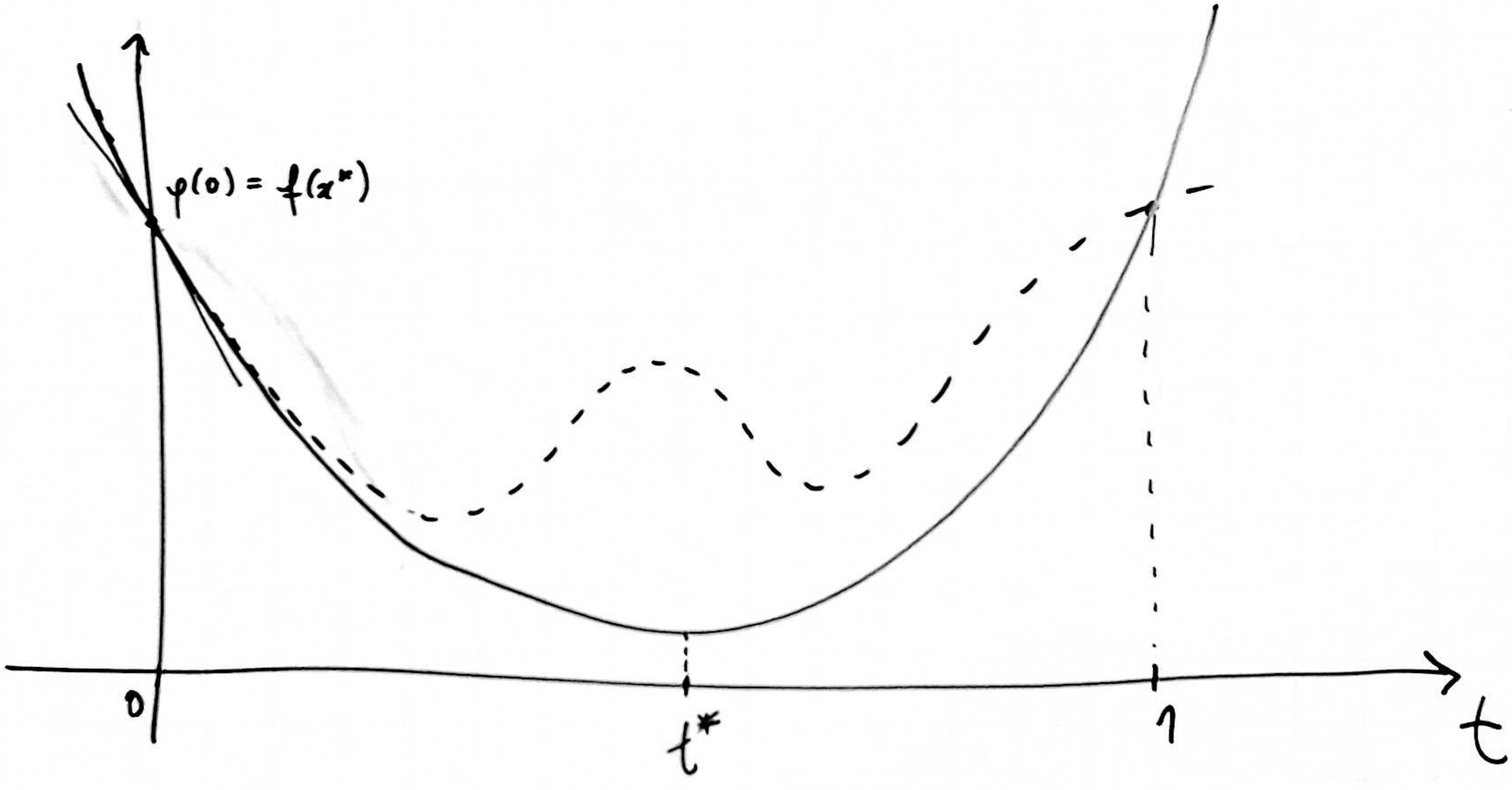
PASSO 1) COMECE COM $t = 1$.

PASSO 2) SE $f(x^k + t d^k) \geq f(x^k)$, DIMINUA t E TESTE NOVAMENTE.

$$t \leftarrow t/2 .$$

- INTERPOLAÇÃO QUADRÁTICA

- $\varphi(t) = f(x^k + t d^k)$. QUERO "$\min\limits_{t \geq 0} \varphi(t)$".
- $\varphi'(t) = \nabla f(x^k + t d^k)^t d^k$.
- $\varphi'(0) = \nabla f(x^k)^t d^k < 0$ (d^k É DIR. DE DESCIDA, QU VOU ESCOLHER ASSIM).



EXISTE UMA PARÁBOLA $p(t) = at^2 + bt + c$ QUE PASSA POR $(0, \varphi(0))$, $(1, \varphi(1))$ E TEM INCLINAÇÃO $\varphi'(0)$ EM $t = 0$.

- $p(0) = \varphi(0) \implies \boxed{c = f(x^k)}.$
- $p'(0) = \varphi'(0) \implies \boxed{b = \nabla f(x^k)^T d^k}.$
- $p(1) = \varphi(1) \implies a + b + c = f(x^k + d^k)$

$$\implies \boxed{a = f(x^k + d^k) - f(x^k) - \nabla f(x^k)^t d^k}.$$

OBS: $a > 0$ POIS A PARÁBOLA TEM CONCAVIDADE PARA CIMA.

RESOLVEMOS AGORA $\min_{t \geq 0} p(t)$:

$$p'(t^*) = 2at^* + b = 0 \underset{a>0}{\Longrightarrow} t^* = \frac{-b}{2a}$$

$$\Longrightarrow \boxed{t^* = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{2\left[f(x^k + d^k) - f(x^k) - \nabla f(x^k)^T d^k\right]}}.$$

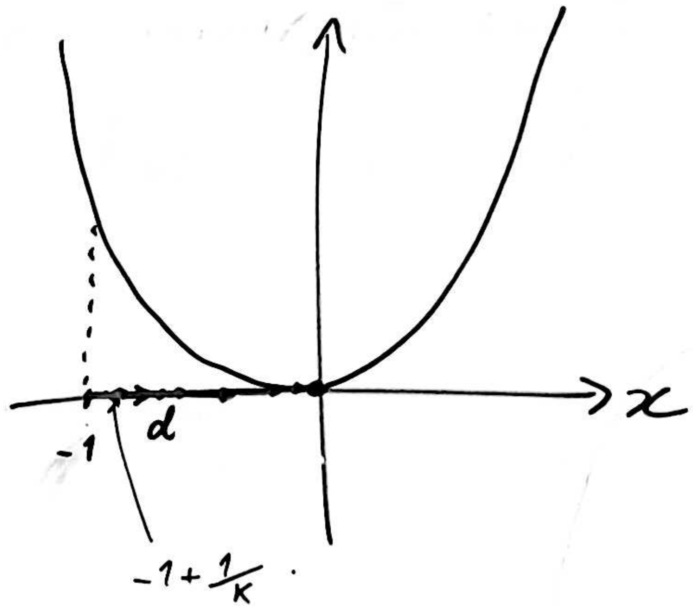
OBSERVE QUE, DE FATO, $t^* > 0$ DADO QUE $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ E $a > 0$.

E SE ISSO DER ERRADO $\left(f(x^k + t^* d^k) \geq f(x^k) \right)$?

- TENTE OUTRA COISA... (BACKTRACKING).

EXEMPLO: $f(x) = x^2$.

- $x^k = -1$.
- $t_k = \frac{1}{k}$, $d^k = 1$.



$$f\left(x^k + \frac{1}{k}\right) < f(x^k).$$

$t_k = \frac{1}{k}$ É UM PASSO MUITO PEQUENO, O DECRÉSCIMO DE f É MUITO PEQUENO, E O ALGORITMO PODERIA ESTACIONAR LONGE DO MINIMIZADOR!

- DECRÉSCIMO SIMPLES: $f(x^k + t_k d^k) < f(x^k)$ ✗ RUIM.
- QUERO UM DECRÉSCIMO "GRANDE" (DECRÉSCIMO SUFICIENTE)

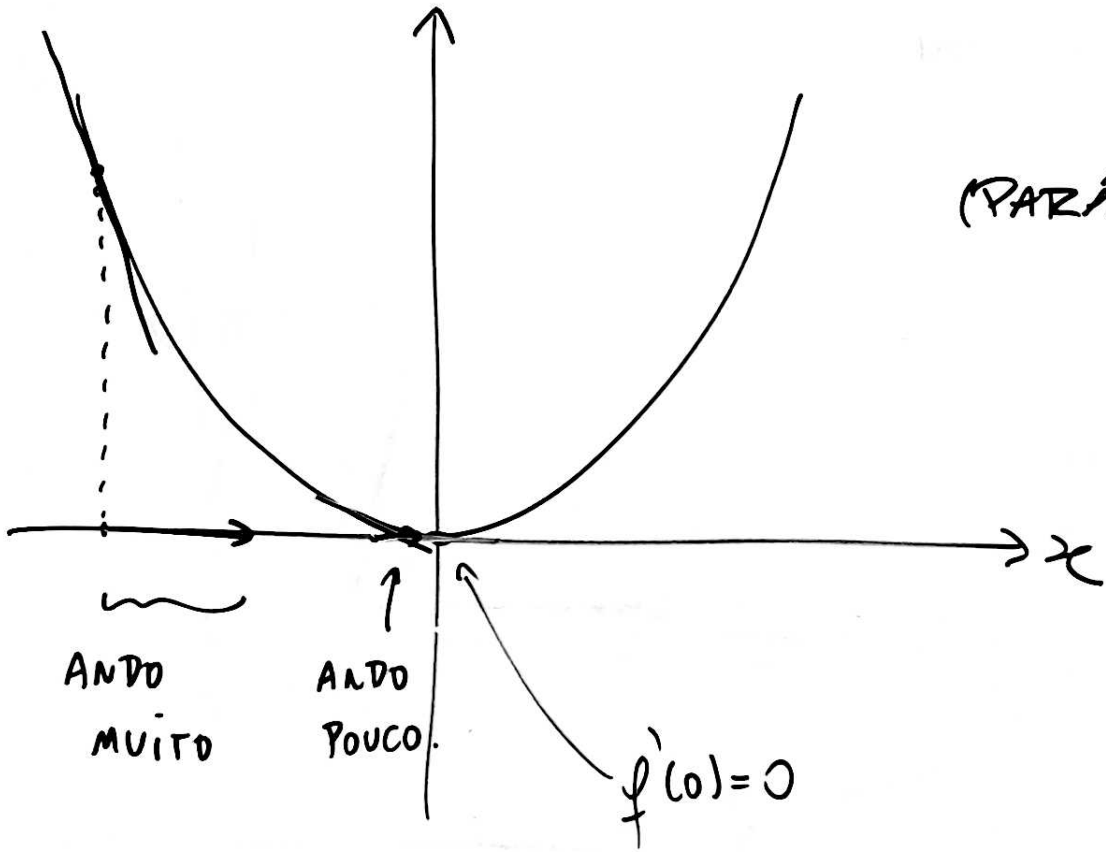
CONDIÇÃO DE ARMIJO.

$$f(x^k + t_k d^k) \leqslant f(x^k) + t_k \eta \nabla f(x^k)^T d^k ,$$

ONDE $\eta \in (0,1)$

FIXO.

(PARÂMETRO).

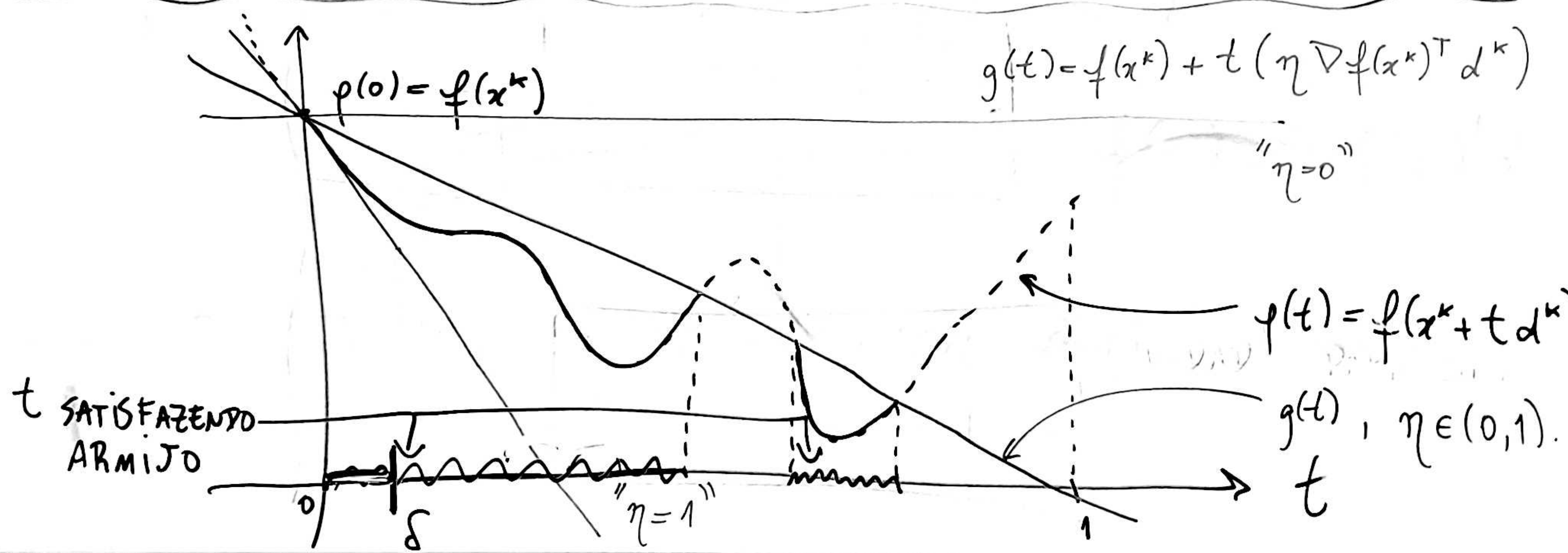


NA PRÁTICA:

PASSO 1) COMECE COM $t = 1$.

PASSO 2) DIMINUA t $(t \leftarrow t/2)$ ATÉ QUE A CONDIÇÃO DE ARMIJO SEJA SATISFEITA.

ESSE PROCEDIMENTO É FINITO (TEO. A SEGUIR).



TEOREMA: SUPONHA QUE f SEJA DIFERENCIÁVEL EM x^k. SEJAM d^k DIREÇÃO DE DESCIDA PARA f A PARTIR DE x^k E $\eta \in (0,1)$. ENTÃO EXISTE $\delta > 0$ TAL QUE

$$f(x^k + t d^k) \leq f(x^k) + t\,\eta\,\nabla f(x^k)^T d^k \quad , \quad \forall t \in [0, \delta].$$

PROVA: SE $\nabla f(x^k)^t d^k = 0$ ENTÃO O RESULTADO SEGUE DA DEF. DE DIR. DE DESCIDA. SUPONHA $\nabla f(x^k)^t d^k < 0$.

TEMOS

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{f(x^k + t d^k) - f(x^k)}{t} = \nabla f(x^k)^t d^k < \eta \nabla f(x^k)^t d^k$$

POIS $\eta < 1$ E $\nabla f(x^k)^t d^k < 0$. ASSIM, EXISTE $\delta > 0$ TAL QUE

$$\frac{f(x^k + t d^k) - f(x^k)}{t} < \eta \nabla f(x^k)^t d^k, \quad \forall t \in (0, \delta)$$

$$\Longrightarrow f(x^k + t d^k) \leq f(x^k) + t \eta \nabla f(x^k)^t d^k, \quad \forall t \in (0, \delta)$$

$\blacksquare$

COMO CALCULAR UMA DIREÇÃO DE DESCIDA d^k?

- DIREÇÕES d^k TAIS QUE $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$.

* MÉTODO DO GRADIENTE

$$\boxed{d^k = -\nabla f(x^k)\ .}$$

ESTA ESCOLHA VALE POIS $\nabla f(x^k)^T d^k = -\|\nabla f(x^k)\|^2 < 0$

$\left(\nabla f(x^k) \neq 0 \text{ POIS O MÉTODO NÃO PAROU} \right)$.

---

* $d^k = -H^k \nabla f(x^k)$, ONDE H^k É DEFINIDA POSITIVA.

ESTA É VÁLIDA POIS

$$\nabla f(x^k)^T d^k = -\nabla f(x^k)^T H^k \nabla f(x^k) < 0 .$$

POR EXEMPLO, $H^k = I$ RECAI NO MÉTODO DO GRADIENTE.

H^k É ATUALIZADA DURANTE O PROCESSO.

(MÉTODOS QUASE-NEWTON).

DUAS ESCOLHAS "FAMOSAS":

- $H^0 = I$,

$$H^{k+1} = H^k + \frac{(p_k p_k^T)}{p_k^T q_k} - \frac{H^k q_k q_k^T H^k}{q_k^T H^k q_k}$$

ONDE $p_k = x^{k+1} - x^k$, $q_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$.

(DFP — DAVIDON – FLETCHER – POWELL) .

<u>TEOREMA</u>: SE H^k É DEF. POSITIVA, ENTÃO H^{k+1} TAMBÉM É.

ASSIM, COMEÇANDO COM $H^0 = I$, TEREMOS UMA SEQUÊNCIA DE MATRIZES $\{H^k\}$ DEFINIDAS POSITIVAS. OU SEJA, AS DIREÇÕES $d^k = -H^k \nabla f(x^k)$ SERÃO DE DESCIDA.

$\odot \; H^0 = I$

$$H^{k+1} = H^k + \left(\frac{1 + q_k^T H^k q_k}{q_k^T p_k}\right)\frac{p_k p_k^T}{p_k^T q_k} - \frac{p_k q_k^T H^k + H^k q_k p_k^T}{q_k^T p_k}$$

ONDE p_k E q_k SÃO COMO ANTES.

(BFGS — BROYDEN — FLETCHER — GOLDFARB — SHANNO)

O TEOREMA ANTERIOR VALE $\left(H^k > 0 \Rightarrow H^{k+1} > 0\right)$.

CARACTERÍSTICAS DOS MÉTODOS QUASE-NEWTON

1) TENTAM IMITAR NEWTON ("O MELHOR")

2) AS ITERAÇÕES SÃO BARATAS COMPUTACIONALMENTE

3) TENTAM SER MELHORES QUE O MÉTODO DO GRADIENTE.

SOBRE TEORIA: "EQUAÇÕES SECANTE" (PROCURE!).

MÉTODO DE NEWTON

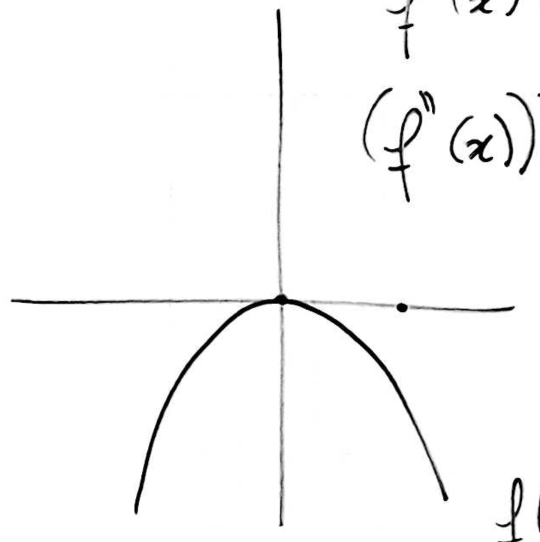
$$d^k = -\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

PROBLEMAS:

1) d^k PODE NÃO SER DIREÇÃO DE DESCIDA, NA MEDIDA EM QUE $\left(\nabla^2 f(x)\right)^{-1} \not> 0$.

EXEMPLO: $f(x) = -x^2$.

$f''(x) = -2 \Rightarrow \left(f''(x)\right)^{-1} = -\frac{1}{2}$.



$f''(x) = -2$.

$\left(f''(x)\right)^{-1} = -\frac{1}{2}$.

$f(x) = -x^2$.

2) $\nabla^2 f(x)$ PODE SER SINGULAR (NÃO INVERSÍVEL).

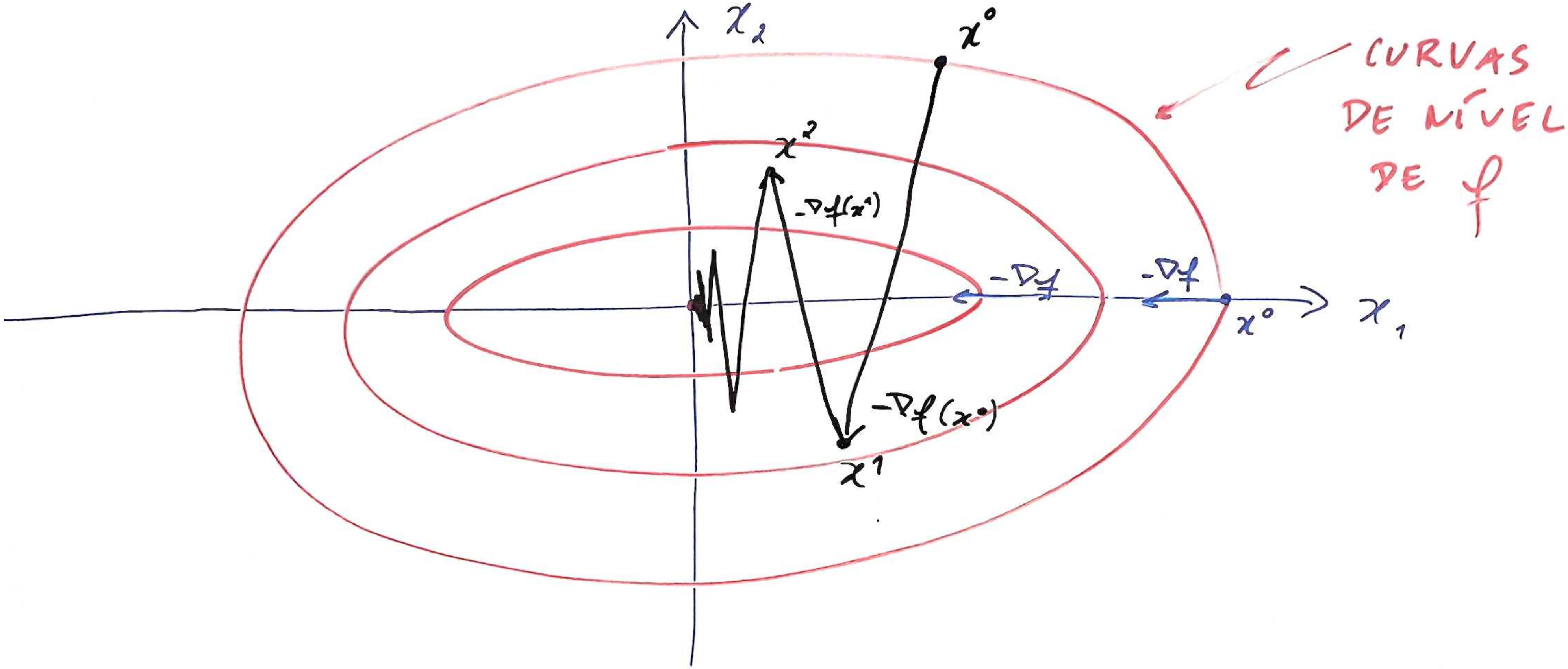
VANTAGEM

"QUANDA DÁ CERTO, DÁ MUITO CERTO!".

- O DECRÉSCIMO DE f É RÁPIDO PERTO DA SOLUÇÃO.

- SOB CERTAS HIPÓTESES, A DIREÇÃO NEWTONIANA SEMPRE FUNCIONA PRÓXIMO À SOLUÇÃO.

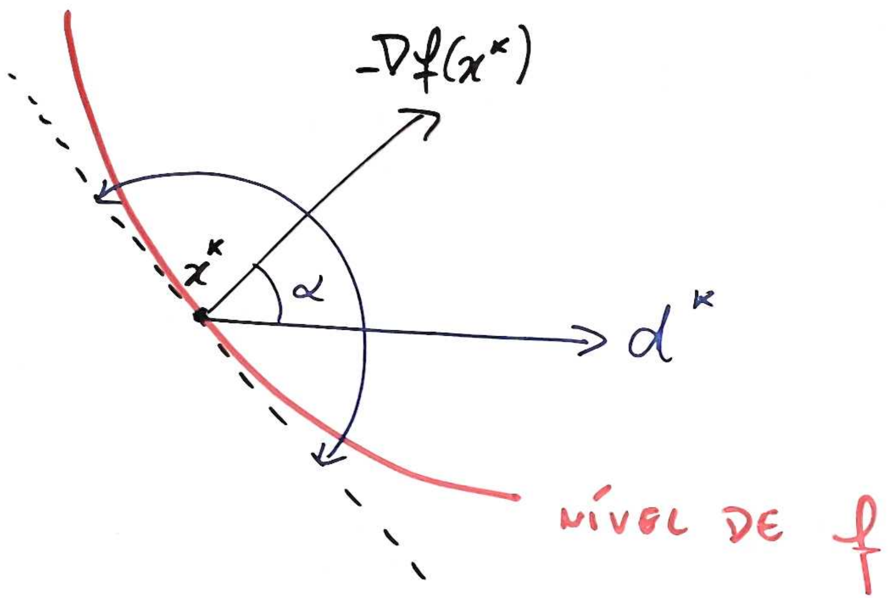
MÉTODO DO GRADIENTE: $d^k = -\nabla f(x^k)$ É UMA BOA ESCOLHA SEMPRE?



ZIG-ZAG (RUIM).

AJUSTANDO A DIREÇÃO.

• CONDIÇÃO DO ÂNGULO



SE $\alpha \approx 90°$, A DIREÇÃO d^k NÃO DECRESCE MUITO f A PARTIR DE x^k. EXIJO QUE

$$\cos \alpha \geq \theta > 0 \quad , \quad \theta \in (0,1) \text{ FIXADO.}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{-\nabla f(x^k)^T d^k}{\|\nabla f(x^k)\| \cdot \|d^k\|} \geq \theta$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\nabla f(x^k)^T d^k \leq -\theta \cdot \|\nabla f(x^k)\| \cdot \|d^k\| .}$$ (CONDIÇÃO DO ÂNGULO)

ONDE $\theta \in (0,1)$ É FIXO.

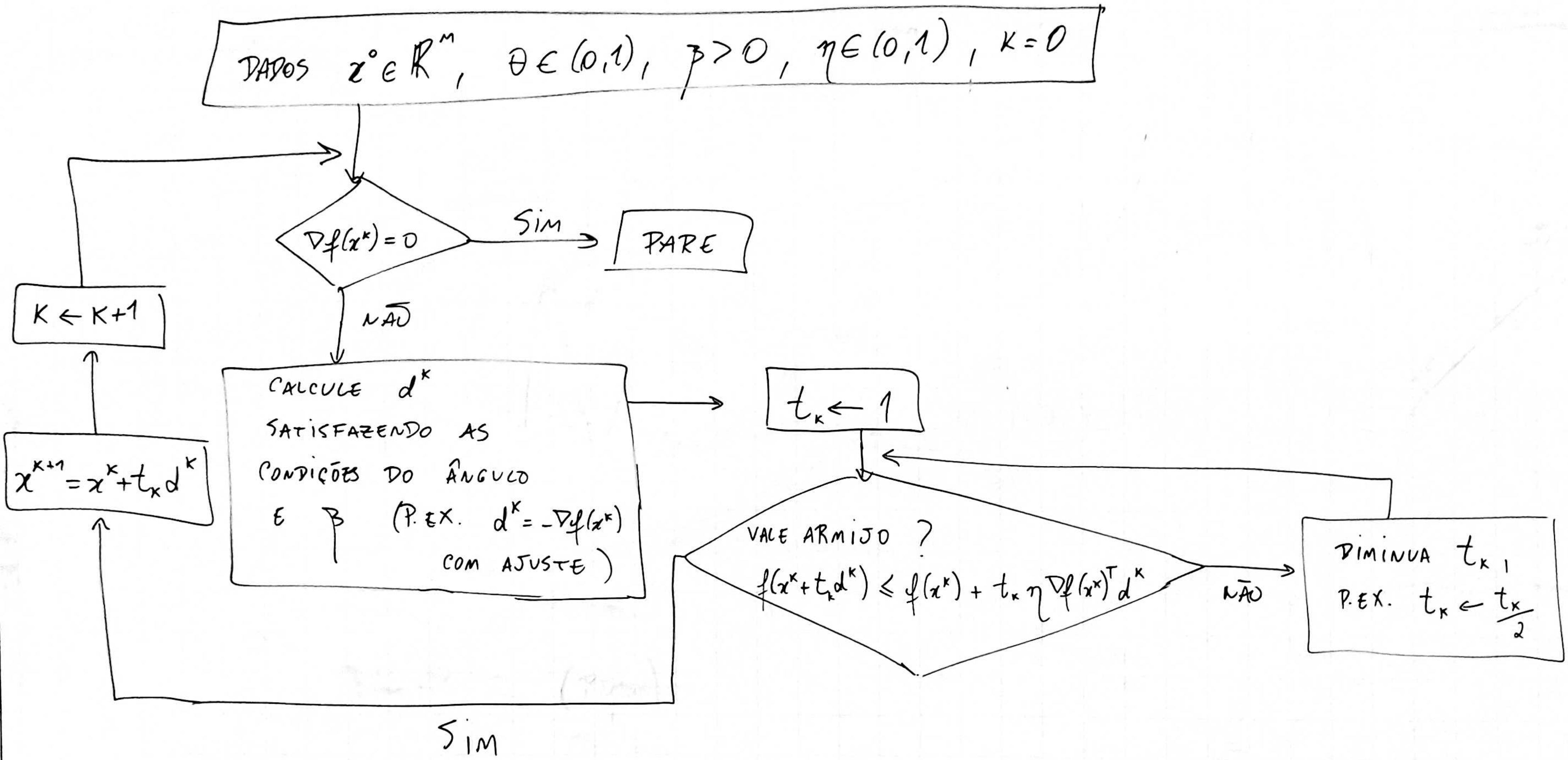
• <u>CONDIÇÃO β</u> : $\|d^k\| \geq \beta \|\nabla f(x^k)\|$, $\beta > 0$ FIXADO.

EVITA QUE LONGE DA SOLUÇÃO $\left(\|\nabla f(x^k)\| \gg 1\right)$, TOMEMOS DIREÇÕES PEQUENAS.

ESSAS DUAS CONDIÇÕES SÃO SATISFEITAS POR $-\nabla f(x^*)$

POSSIVELMENTE MULTIPLICANDO $-\nabla f(x^*)$ POR β.

ESQUEMA DE DESCIDA.



TEOREMA: O ESQUEMA ANTERIOR PÁRA COM ALGUM VALOR K TAL QUE $\nabla f(x^k) = 0$ OU GERA UMA SEQUÊNCIA INFINITA $\{x^k\}$ TAL QUE QUALQUER PONTO DE ACUMULAÇÃO É UM PONTO ESTACIONÁRIO DE f $(\nabla f(x^*) = 0)$.

A CONVERGÊNCIA É GLOBAL: O MÉTODO FUNCIONA INICIANDO DE QUALQUER PONTO x^0.

SOBRE A CONVERGÊNCIA GLOBAL DO MÉTODO DE DESCIDA:

* TAMANHO DO PASSO: AO INVÉS DE "$t_{novo} = \frac{t}{2}$", É SUFICIENTE EXIGIR $t_{novo} \in [0.1t, 0.9t]$ (SALVAGUARDA).

- $t_{novo} = \frac{t}{2}$ SATISFAZ A SALVAGUARDA.

- INTERPOLAÇÃO QUADRÁTICA PODE NÃO SATISFAZER...
SOLUÇÃO: FAÇA A INTERPOLAÇÃO, OBTENDO t^*.
SE $t^* \in [0.1t, 0.9t]$, $t_{novo} = t^*$. CASO CONTRÁRIO, PROJETE t^* NO INTERVALO $[0.1t, 0.9t]$.

* SUPOMOS f LIMITADA INFERIORMENTE.

COM ISSO É POSSÍVEL PROVAR O TEOREMA DE CONVERGÊNCIA.