Chapter 6

Minimização irrestrita e busca linear

A minimização de uma função contínua de n variáveis, sem vínculos, é um dos problemas clássicos da otimização não linear. Existem inúmeras situações da realidade que são modeladas dessa maneira. Quando a função é derivável, a condição necessária de primeira ordem para minimizadores estabelece que o gradiente deve se anular. Em casos muito simples, como os tratados nos textos de cálculo multivariado, é possível calcular manualmente todos os pontos críticos o que, geralmente, leva a encontrar soluções globais, quando estas existem. Mas, quando o número de variáveis ou a complexidade da função aumentam, as manipulações isoladas são insuficientes para achar sequer pontos estacionários. É necessário, então, apelar para métodos numéricos, quase sempre iterativos. Os algoritmos estudados neste capítulo funcionam da seguinte maneira: dado o iterando x_k determina-se uma direção d_k ao longo da qual, em princípio, é possível fazer diminuir o valor da função objetivo. A seguir, calcula-se um comprimento de passo que permita uma diminuição razoável. O método de Newton, os quase-Newton, e os chamados métodos de Newton truncados podem ser adaptados para funcionar com este esquema.

6.1 Algoritmos gerais

Vamos considerar o problema de minimização sem restrições

$$\begin{array}{c} \text{Minimizar } f(x) \\ x \in I\!R^n \end{array} \tag{6.1.1}$$

com a hipótese inicial de que $f \in C^1(I\!R^n)$.

Neste capítulo consideraremos sempre que $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana, embora muitos resultados sejam independentes dessa identificação. Os métodos para resolver (6.1.1) são iterativos. A aproximação x_{k+1} está bem definida e satisfaz $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ se $\nabla f(x_k) \neq 0$. Para a definição desses algoritmos, usaremos direções ao longo das quais, pelo menos dando passos muito pequenos, é possível fazer decrescer $f(x)$. Assim, dado $x \in I\!R^n$, $d \in I\!R^n$ é chamada *direção de descida a partir de* x se existe $\varepsilon > 0$ tal que, para todo $t \in (0, \varepsilon]$,

$$f(x + td) < f(x) \ .$$

As direções que formam um ângulo maior que 90 graus com o gradiente são direções de descida, como vemos no seguinte lema.

Lema 6.1.1
Se $\nabla f(x)^T d < 0$ *então* d *é direção de descida.*

Prova: Como $\nabla f(x)^T d = \lim_{t \to 0} \dfrac{f(x + td) - f(x)}{t}$ e por hipótese $\nabla f(x)^T d < 0$, então para todo $t > 0$ suficientemente pequeno, temos $f(x + td) < f(x)$.
QED

A direção $d = -\nabla f(x)$ é chamada *direção de máxima descida a partir de* x. Se consideramos todas as direções com norma euclidiana unitária no espaço, é fácil ver que a derivada direcional mais negativa se realiza nessa direção. A solução do problema

$$\text{Minimizar } \bar{f}(x) \text{ sujeita a } \|x - \bar{x}\| \leq \varepsilon,$$

onde $\bar{f}$ é qualquer função tal que $\nabla \bar{f}(\bar{x}) = \nabla f(\bar{x})$, é um ponto $x(\varepsilon)$ tal que $[x(\varepsilon) - \bar{x}]/\|x(\varepsilon) - \bar{x}\|$ tende à direção de máxima descida quando ε tende a 0.

O protótipo de todos os métodos que veremos neste capítulo é o seguinte algoritmo.

Algoritmo 6.1.2 - Algoritmo básico que usa direções de descida.
Dado $x_k \in I\!R^n$ tal que $\nabla f(x_k) \neq 0$, escolher d_k direção de descida e $t_k > 0$ tais que

$$f(x_k + t_k d_k) < f(x_k) \ .$$

Tomar $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$.

Exercício 6.1: Mostrar que o Algoritmo 6.1.2 está bem definido, no sentido de que, sempre que $\nabla f(x_k) \neq 0$, é possível encontrar t_k satisfazendo a condição de descida.

Naturalmente, gostaríamos que a aplicação do Algoritmo 6.1.2 nos levasse sempre, depois de um número razoável de iterações, a um minimizador global de f. Isso não vai ser possível. De fato, o algoritmo assim definido é impotente até para nos conduzir a pontos estacionários no limite. Existem exemplos em uma variável que mostram que a seqüência gerada por ele pode convergir a um ponto não estacionário.

Exercício 6.2: Exibir um exemplo do tipo dos mencionados no parágrafo acima.

Uma das razões pelas quais o Algoritmo 6.1.2 fracassa em encontrar minimizadores ou, até, pontos estacionários, é que pedir apenas que $f(x_k + t_k d_k)$ seja menor que $f(x_k)$ é um objetivo excessivamente modesto, pois, na realidade, um descenso mais enérgico pode ser conseguido ao longo de direções de descida. A chamada "condição de Armijo" substitui o descenso simples e serve para invalidar alguns dos contra-exemplos que podem ser construídos para desqualificar a condição de descenso simples. No seguinte teorema mostramos que a obtenção do descenso baseado na condição de Armijo é sempre possível.

Teorema 6.1.3 - Condição de Armijo.
Sejam $x, d \in I\!R^n$ tais que $\nabla f(x) \neq 0$, $\nabla f(x)^T d < 0$ e $\alpha \in (0,1)$. Existe $\varepsilon = \varepsilon(\alpha) > 0$ tal que

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d \qquad (6.1.2)$$

para todo $t \in (0, \varepsilon]$.

Prova: Temos

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

e portanto

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t \nabla f(x)^T d} = 1.$$

Logo, existe $\varepsilon > 0$ tal que para todo $t \in (0, \varepsilon]$,

$$\frac{f(x+td) - f(x)}{t \nabla f(x)^T d} \geq \alpha.$$

Ou seja, para todo $t \in (0, \varepsilon]$, $f(x+td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d$. **QED**

Exercício 6.3: Encontrar um exemplo em uma variável onde a seqüência gerada pelo Algoritmo 6.1.2 tenha pontos de acumulação não-estacionários e onde a condição de Armijo não esteja sendo satisfeita em infinitas iterações.

Incorporando a condição de Armijo, o Algoritmo 6.1.2 pode ser reescrito da seguinte maneira.

Algoritmo 6.1.4 - Algoritmo básico de descida com Armijo.
Dado $\alpha \in (0,1)$ e dados x_k e d_k tais que $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$,
escolher $t_k > 0$ como o maior dos números $\{1, 1/2, 1/4, 1/8, \ldots\}$ tal que

$$f(x_k + t_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha t_k \nabla f(x_k)^T d_k\ . \tag{6.1.3}$$

Tomar $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$.

Novamente, devemos lamentar que a condição (6.1.3), embora mais exigente que a primeira, não garanta as propriedades desejáveis de um método de minimização. Com efeito, até em uma variável é possível encontrar exemplos para os quais o Algoritmo 6.1.4 converge a um ponto não estacionário. A razão é que, na condição de Armijo, nada impede a tomada de passos excessivamente pequenos, produzindo um fenômeno do tipo "Aquiles e a tartaruga".

Exercício 6.4: Encontrar contra-exemplo em $I\!R$ onde o Algoritmo 6.1.4 convirja a um ponto não-estacionário.

Pode ser que passos muito pequenos sejam inevitáveis, simplesmente porque passos grandes não permitem um decréscimo adequado, mas é imperdoável, do ponto de vista do desenho algorítmico, que passos "grandes" não sejam, pelo menos, tentados. Por isso, decidimos tentar sempre, primeiro o passo $t_k = 1$ e diminuir o passo sem exageros apenas quando a condição de Armijo não é satisfeita. Entretanto, esse mecanismo não inibe, por si só, os passos muito curtos, porque poderia ser que o próprio tamanho de d_k fosse muito pequeno. Isso motiva, também, a introdução de uma condição adicional para d_k, que chamaremos "condição β":

$$\|d_k\| \geq \beta \|\nabla f(x_k)\| \tag{6.1.4}$$

com $\beta > 0$.
A condição de Armijo (6.1.2) e a condição (6.1.4) são suficientes para eliminar os inquietantes contra-exemplos unidimensionais, mas ainda não bastam para garantir que todo ponto de acumulação seja estacionário. De fato, se $n \geq 2$, as direções de descida d_k poderiam ser maldosamente escolhidas de maneira que o ângulo entre d_k e $\nabla f(x_k)$ tendesse a 90 graus. Ou seja, o cosseno entre d_k e $\nabla f(x_k)$, embora negativo, tenderia a zero. Essa situação poderia provocar convergência a um ponto não estacionário. Para inibir essa eventualidade, vamos impor que os citados cossenos estejam uniformemente separados de 0. Logo, as direções toleráveis formarão uma espécie de cone agudo com eixo na semi-reta gerada por $-\nabla f(x_k)$. Por razões óbvias, esta será chamada "condição do ângulo":

$$\nabla f(x_k)^T d_k \leq -\theta \|\nabla f(x_k)\| \, \|d_k\|, \tag{6.1.5}$$

com $\theta \in (0, 1)$ e $\| \cdot \| = \| \cdot \|_2$.

Exercício 6.5: Encontrar um contra-exemplo bi-dimensional mostrando que sob (6.1.2) e (6.1.4) ainda podemos ter convergência a um ponto não-estacionário.

Vamos então reformular o Algoritmo 6.1.4, incorporando as condições (6.1.4) e (6.1.5), desculpando-nos por usar o termo "backtracking" sem traduzir.

Algoritmo 6.1.5 - Algoritmo de descida com backtracking.
Sejam $x_0 \in I\!R^n, \ \alpha \in (0, 1), \ \beta > 0, \ \theta \in (0, 1)$.
Dado x_k, a nova aproximação x_{k+1} é obtida da seguinte maneira:
(1) Se $\nabla f(x_k) = 0$, parar.

(2) Escolher $d_k \in I\!R^n$ tal que

$$\begin{array}{rcl} \|d_k\| & \geq & \beta \|\nabla f(x_k)\| \\ \nabla f(x_k)^T d_k & \leq & -\theta \|\nabla f(x_k)\| \, \|d_k\| \ . \end{array}$$

(3) $t = 1$.

(4) Enquanto $f(x_k + t d_k) > f(x_k) + \alpha t \nabla f(x_k)^T d_k$,
escolher novo $t \in [0.1t, 0.9t]$.

(5) $x_{k+1} = x_k + td_k$.

Exercício 6.6: Mostrar que o Algoritmo 6.1.5 está bem definido.

Computacionalmente, quando a condição de Armijo falha no passo (4) do Algoritmo 6.1.5 para $\bar{t}$, a escolha de um novo $t \in [0.1\bar{t}, 0.9\bar{t}]$ pode ser feita minimizando-se a parábola cúbica que interpola $\varphi(0)$, $\varphi(\bar{t})$, $\varphi'(0)$, $\varphi'(\bar{t})$, onde $\varphi(t) = f(x_k + td_k)$ e $\varphi'(t) = \nabla f(x_k + td_k)^T d_k$. Se o minimizador desta cúbica estiver no intervalo de salvaguarda $[0.1\bar{t}, 0.9\bar{t}]$, adotamos t_{novo} como sendo este minimizador. Caso contrário, $t_{\text{novo}} = 0.5\bar{t}$.

Exercício 6.7: A estratégia descrita acima para obter um novo t após um fracasso em Armijo demanda a avaliação extra de $\nabla f(x_k + \bar{t}d_k)$. Propor uma outra estratégia, usando inicialmente uma parábola interpolante em $\varphi(0)$, $\varphi(\bar{t})$ e $\varphi'(0)$ e então, caso ocorra(m) novo(s) fracasso(s) em Armijo, prosseguir com cúbica(s) interpolante(s) em $\varphi(0)$, $\varphi'(0)$, $\varphi(\bar{t})$ e $\varphi(\bar{\bar{t}})$, onde $\bar{t}$ é o último passo fracassado e $\bar{\bar{t}}$ o passo fracassado anterior.

Antes de passar a resultados teóricos, discutiremos a "naturalidade" das condições (6.1.4) e (6.1.5). Vemos que tanto o parâmetro α da condição de Armijo quanto o parâmetro θ em (6.1.5) são adimensionais. Portanto, faz sentido recomendar valores adequados para esses parâmetros. Usualmente $\alpha = 10^{-4}$ ou 0.1 e $\theta = 10^{-6}$. Já o parâmetro β em (6.1.4) tem dimensão física que depende das unidades das variáveis e da função objetivo, o que torna sua escolha dependente do escalamento do problema. Devemos notar, no entanto, que se $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$, então $\|B_k\| \, \|d_k\| \geq \|\nabla f(x_k)\|$ ou seja $\|d_k\| \geq \dfrac{1}{\|B_k\|}\|\nabla f(x_k)\|$. Isto sugere um valor natural para β que é o inverso de uma cota superior para a norma da matriz Hessiana, pois assim o algoritmo não inibe a aceitação da direção de Newton.

Exercício 6.8: Supondo $f \in C^2(I\!R^n)$, mostrar que, se o número de condição da matriz $\nabla^2 f(x_k)$ é uniformemente limitado por c, então $1/c$ é um valor natural para θ quando $d_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$.

Para o Algoritmo 6.1.5 podemos provar um teorema "de convergência global". O sentido da palavra "global" aqui se refere a que a convergência ocorre independentemente do ponto inicial, e, de maneira nenhuma implica convergência a minimizadores globais.

Teorema 6.1.6 - Convergência Global.
Se x_* é ponto limite de uma seqüência gerada pelo Algoritmo 6.1.5, então $\nabla f(x_*) = 0$.

Prova: Denotamos $s_k = x_{k+1} - x_k = td_k$ para todo $k \in \mathcal{N}$. Seja $K_1 \underset{\infty}{\subsetneq} \mathcal{N}$ tal que $\lim\limits_{k \in K_1} x_k = x_*$, onde $\underset{\infty}{\subsetneq}$ denota subconjunto infinito.

Consideramos dois casos:
(a) $\lim\limits_{k \in K_1} \|s_k\| = 0$.
(b) Existem $K_2 \underset{\infty}{\subsetneq} K_1$ e $\varepsilon > 0$ tais que $\|s_k\| \geq \varepsilon$ para todo $k \in K_2$.

Suponhamos inicialmente que valha (a).
(a1) Se existe $K_3 \underset{\infty}{\subsetneq} K_1$, tal que $s_k = d_k$, então

$$\|\nabla f(x_*)\| = \lim_{k \in K_3} \|\nabla f(x_k)\| \leq \lim_{k \in K_3} \frac{\|d_k\|}{\beta} = \lim_{k \in K_3} \frac{\|s_k\|}{\beta} = 0 \, .$$

(a2) Se para todo $k \in K_1, k \geq k_0$ temos $t < 1$, então, para todo $k \in K_1, k \geq k_0$ existe $\bar{s_k}$ um múltiplo de s_k tal que $\|\bar{s_k}\| \leq 10\|s_k\|$ e

$$f(x_k + \bar{s_k}) > f(x_k) + \alpha \nabla f(x_k)^T \bar{s_k} \, .$$

Claramente,

$$\lim_{k \in K_1} \|\bar{s_k}\| = 0$$

e

$$\nabla f(x_k)^T \bar{s_k} \leq -\theta \|\nabla f(x_k)\| \, \|\bar{s_k}\| \tag{6.1.6}$$

para todo $k \in K_1, k \geq k_0$.
Seja v um ponto de acumulação de $\dfrac{\bar{s_k}}{\|\bar{s_k}\|}$. Então $\|v\| = 1$ e existe $K_4 \underset{\infty}{\subsetneq} K_1$ tal que $\lim\limits_{k \in K_4} \dfrac{\bar{s_k}}{\|\bar{s_k}\|} = v$.

Portanto,

$$\nabla f(x_*)^T v = \lim_{k \in K_4} \nabla f(x_k)^T v = \lim_{k \in K_4} \nabla f(x_k)^T \frac{\bar{s_k}}{\|\bar{s_k}\|}$$

e por (6.1.6) segue que

$$\nabla f(x_*)^T v \leq -\theta \lim_{k \in K_4} \|\nabla f(x_k)\| \, . \tag{6.1.7}$$

Agora, para todo $k \in K_4$,

$$f(x_k + \bar{s_k}) - f(x_k) = \nabla f(x_k + \xi_k \bar{s_k})^T \bar{s_k} \ , \ \ \xi_k \in (0,1).$$

Portanto, pelo fracasso da condição de Armijo para $\bar{s_k}$,

$$\nabla f(x_k + \xi \bar{s_k})^T \bar{s_k} > \alpha \nabla f(x_k)^T \bar{s_k} \ , \ \ \text{para todo} \ \ k \in K_4 \ .$$

Ou seja, para todo $k \in K_4$,

$$\nabla f(x_k + \xi \bar{s_k})^T \frac{\bar{s_k}}{\|\bar{s_k}\|} > \alpha \nabla f(x_k)^T \frac{\bar{s_k}}{\|\bar{s_k}\|} \ .$$

Passando ao limite para $k \in K_4$ temos:

$$\nabla f(x_*)^T v \geq \alpha \nabla f(x_*)^T v$$

ou

$$(1-\alpha) \nabla f(x_*)^T v \geq 0 \ .$$

Logo

$$\nabla f(x_*)^T v \geq 0$$

e por (6.1.7) segue que $\nabla f(x_*)^T v = 0$. Se $\nabla f(x_*) \neq 0$, novamente por (6.1.7), para $k \in K_4$, k suficientemente grande,

$$0 = \nabla f(x_*)^T v \leq -\theta \|\nabla f(x_k)\| < 0 \ .$$

Portanto, $\nabla f(x_*) = 0$.

Suponhamos agora a validade de (b): $\|s_k\| \geq \varepsilon$ para todo $k \in K_2$. Por Armijo,

$$\begin{aligned} f(x_k + s_k) &\leq f(x_k) + \alpha \nabla f(x_k)^T s_k \\ &\leq f(x_k) - \alpha \theta \|\nabla f(x_k)\| \, \|s_k\| \\ &\leq f(x_k) - \alpha \theta \varepsilon \|\nabla f(x_k)\| \ , \end{aligned}$$

para todo $k \in K_2$.
Portanto,

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq -\alpha \theta \varepsilon \|\nabla f(x_k)\|$$

ou seja,

$$\frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{\alpha \theta \varepsilon} \geq \|\nabla f(x_k)\| \ .$$

Passando ao limite para $k \in K_2$, pela continuidade de f temos: $\lim_{k \in K_2} \|\nabla f(x_k)\| = 0$ e portanto $\nabla f(x_*) = 0$. **QED**

Exercício 6.8' Suponha que, no Algoritmo 6.1.5, temos que existe uma constante $c > 0$ tal que

$$\|d_k\| \leq c\|\nabla f(x_k)\|$$

para todo k.
(a) Provar que se x_* é um ponto limite da seqüência e, além disso, numa vizinhança de x_* não existe nenhum outro ponto onde se anule o gradiente, então a seqüência converge a x_*. Sugerência: construa uma "coroa circular" ao redor de x_* onde somente pode existir um número finito de iterandos.
(b) Provar que se, além do suposto em (a), x_* é um minimizador local, então existe $\varepsilon > 0$ tal que a seqüência converge a x_* sempre que $\|x_0 - x_*\| \leq \varepsilon$. (Convergência local.) Sugerência: construa, além da coroa, um conjunto de nível contido dentro da bola menor.
(c) Mostrar que (b) não se cumpre se, em vez de minimizador local, x_* é meramente um ponto sela. (Exemplo unidimensional.) Apesar disso se cumpre (a)! Discutir estes fatos.

6.2 O método de Newton

No Capítulo 5 apresentamos o método de Newton como um método rápido para resolver sistemas não lineares, com convergência local. Como $\nabla f(x) = 0$ é um sistema não linear, esse método pode ser aplicado e, muitas vezes, dará bons resultados. No entanto, o método de Newton para sistemas não dá preferência a minimizadores sobre maximizadores, já que a condição de otimalidade para ambos tipos de extremos é a mesma. Por outro lado, sabemos, pelo Teorema 6.1.6, quais são os elementos que deve possuir um algoritmo globalmente convergente. É natural, em conseqüência, tentar modificar o método local de maneira que manifeste predileção pelos minimizadores e convirja independentemente do ponto inicial.
Observemos primeiro que, quando as direções d_k são geradas como soluções de um sistema linear $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$, temos que $d_k^T B_k d_k = -d_k^T \nabla f(x_k)$, portanto, direções de descida são geradas se $B_k > 0$. Logo, é bastante sensato impor que as matrizes que geram direções de busca em métodos de minimização sejam definidas positivas.
Em continuação descrevemos uma modificação do método de Newton local que o converte em caso particular do Algoritmo 6.1.5. Usaremos a notação

$g(x) = \nabla f(x)$.

Algoritmo 6.2.1 - Newton com busca linear.
Dados $\alpha \in (0, 1)$, $\beta > 0$, $\theta \in (0, 1)$ e $x_k \in I\!R^n$,

(1) Se $g(x_k) = 0$, parar.

(2) Tentar a fatoração de Cholesky: $\nabla^2 f(x_k) = LDL^T$.

(3) Se houve sucesso em (2), obter d_k resolvendo

$$Lz = -g(x_k) \quad \text{e} \quad DL^T d_k = z\ .$$

(4) Se (2) fracassou, definir $B_k = \nabla^2 f(x_k) + \mu I, \mu > 0$, de maneira que $B_k > 0$. Obter a fatoração de Cholesky: $B_k = \bar{L}\bar{D}\bar{L}^T$ e calcular d_k resolvendo

$$\bar{L}z = -g(x_k) \quad \text{e} \quad \bar{D}\bar{L}^T d_k = z\ .$$

(5) Se $g(x_k)^T d_k > -\theta \|g(x_k)\|\ \|d_k\|$, fazer $\mu \leftarrow \max\{2\mu, 10\}$ e repetir o Passo 4, como se tivesse havido fracasso na fatoração de Cholesky.

(6) Se $\|d_k\| < \beta \|g(x_k)\|$, corrigir:

$$d_k \leftarrow \beta \frac{\|g(x_k)\|}{\|d_k\|} d_k\ .$$

(7) Obter t por "backtracking" de modo a satisfazer

$$f(x_k + td_k) \leq f(x_k) + \alpha t g(x_k)^T d_k,$$

definir

$$x_{k+1} = x_k + td_k$$

e voltar para (1).

Quando a Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$ é definida positiva, automaticamente teremos que uma condição de tipo (6.1.5) se verifica com θ igual ao recíproco do número de condição de $\nabla^2 f(x_k)$. Ao mesmo tempo, uma condição de tipo (6.1.4) vale com $\beta = 1/\|\nabla^2 f(x_k)\|$. Logo, se θ e β são escolhidos suficientemente pequenos, as condições (6.1.5) e (6.1.4) serão satisfeitas e passaremos diretamente ao Passo 7 com $d_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} g(x_k)$. Portanto, quase sempre, essa será a direção "de busca" no caso definido positivo. Se a Hessiana

não é definida positiva, no Passo 4 a diagonal é aumentada até conseguir que todos os autovalores sejam maiores que 0. Neste caso, é improvável que a condição (6.1.5) não seja satisfeita, mesmo assim, testamos essa desigualdade e continuamos aumentando a diagonal se ela não vale. Para $\mu \to \infty$ a direção $-B_k^{-1}g(x_k)$ tende a ser a direção de $-g(x_k)$, portanto, mais tarde ou mais cedo, conseguiremos um λ para o qual (6.1.5) se satisfaz. Agora, no processo de aumentar λ, o comprimento de d_k diminui, logo, é necessário testar se (6.1.4) continua valendo. Se assim não for, no Passo 6, aumentamos o tamanho de d_k até atingir uma longitude que garanta (6.1.4).
É interessante observar que, devido aos resultados sobre minimização em bolas do Capítulo 4, a direção $d_k = -[\nabla^2 f(x_k) + \lambda I]^{-1} g(x_k)$ é solução do problema quadrático

$$\text{Minimizar } \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x_k) d + g(x_k)^T d$$
$$\text{sujeita a } \|d\| \leq \Delta,$$

onde $\Delta = \| - [\nabla^2 f(x_k) + \lambda I]^{-1} g(x_k)\|$. Ou seja, entre todas as direções possíveis cujo comprimento é menor ou igual a $\|d_k\|$, em d_k, a aproximação quadrática de segunda ordem de f toma o valor mínimo .

Exercício 6.9: Viabilizar o Passo 4 do Algoritmo 6.2.1, propondo escolhas para μ que explorem o conhecimento de $\nabla^2 f(x_k)$ (por exemplo, usando os discos de Gerschgorin).

Exercício 6.10: Mostrar que as correções propostas nos passos (5) e (6) do Algoritmo 6.2.1 são satisfatórias. Interpretá-las geometricamente. Expor exemplos numéricos.

Exercício 6.11: "Inventar" o método do gradiente, onde $d_k \equiv -g(x_k)$, e outros métodos globais. Discutir possíveis propriedades.

Vimos acima que, quase sempre, se a Hessiana é definida positiva, a direção produzida pelo Algoritmo 6.2.1 coincidirá com o passo que seria calculado pelo método de Newton local aplicado a $g(x) = 0$. No entanto, isso não significa que esse passo será aceito, já que a condição de Armijo poderia não se cumprir, obrigando a uma ou mais reduções de t. Agora, como o método de Newton local, ou puro, tem convergência muito rápida na proximidade de soluções boas, é desejável que, quando x_k está perto de uma dessas soluções, a condição de Armijo se satisfaça, caso contrário estaríamos rejeitando incrementos essencialmente bons. Felizmente, o método de Newton satisfaz esse requisito, como veremos no seguinte teorema. Usaremos, como hipótese, que $f \in C^3(I\!R^n)$ (na realidade, hipóteses mais fracas são suficientes) para podermos utilizar, de maneira bastante forte, uma fórmula de Taylor com resíduo de segunda ordem.

Teorema 6.2.2
Seja $\{x_k\}$ gerada pelo Algoritmo 6.2.1 com $\alpha \in (0,1)$, x_* um ponto limite de $\{x_k\}$ tal que $\nabla f(x_*) = 0$ e $\nabla^2 f(x_*) > 0$. Então a seqüência converge para x_*. Além disso, existe $\varepsilon > 0$ tal que, se $\|x_k - x_*\| \leq \varepsilon$, então

$$f(x_k + d_k) \leq f(x_k) + \alpha g(x_k)^T d_k, \tag{6.2.1}$$

com $d_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} g(x_k)$ e $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$.

Prova: Sabemos que x_* é minimizador local estrito de f e, pelo Teorema da Função Inversa, existe uma vizinhança de x_* que não contém soluções de $g(x) = 0$ além de x_*. Seja, então, $\varepsilon_0 > 0$ tal que $f(x) > f(x_*)$ e $g(x) \neq 0$ sempre que $0 < \|x - x_*\| \leq \varepsilon_0$. Vejamos primeiro que

$$\lim_{k \to \infty} x_k = x_*, \tag{6.2.2}$$

ou seja, x_* é o único ponto limite da seqüência neste caso. Escrevemos, para simplificar, $B_k = \nabla^2 f(x_k)$. Sejam $\varepsilon_1 \in (0, \varepsilon_0), M > 0$ tais que $\|\nabla^2 f(x)^{-1}\| \leq M$ sempre que $\|x - x_*\| \leq \varepsilon_1$. Portanto, quando $\|x_k - x_*\| \leq \varepsilon_1$, temos $\|B_k^{-1}\| \leq M$ e

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \|d_k\| \leq \|B_k^{-1}\| \|g(x_k)\| \leq M \|g(x_k)\|. \tag{6.2.3}$$

Portanto, pela continuidade de $g(x)$, existe $\varepsilon_2 \leq \frac{\varepsilon_1}{2}$ tal que

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{\varepsilon_1}{2} \text{ sempre que } \|x_k - x_*\| \leq \varepsilon_2. \tag{6.2.4}$$

Agora, f é contínua na coroa $\varepsilon_2 \leq \|x - x_*\| \leq \varepsilon_1$. Portanto, atinge um valor mínimo m em algum ponto dessa região. Pela suposição feita sobre ε_0, temos que $m > f(x_*)$. Definimos

$$V = \{x \in I\!R^n \mid \|x - x_*\| < \varepsilon_2 \text{ e } f(x) < m\}. \tag{6.2.5}$$

O conjunto V é uma vizinhança aberta de x_*, portanto, como x_* é um ponto limite de $\{x_k\}$, existem infinitos índices k para os quais $x_k \in V$. Se k_0 é um desses índices, então, por (6.2.4),

$$\|x_{k_0+1} - x_*\| \leq \|x_{k_0} - x_*\| + \|x_{k_0+1} - x_{k_0}\| \leq \varepsilon_2 + \frac{\varepsilon_1}{2} \leq \varepsilon_1. \tag{6.2.6}$$

Ao mesmo tempo, exceto no caso trivial em que $x_{k_0} = x_*$, que podemos analisar por separado,

$$f(x_{k_0+1}) < f(x_{k_0}) < m. \tag{6.2.7}$$

Logo, pela definição de m e pelas desigualdades (6.2.6) e (6.2.7), x_{k_0+1} está na bola de raio ε_1 mas não na coroa definida por ε_1 e ε_2. Ou seja, $\|x_{k_0+1} - x_*\| < \varepsilon_2$. Portanto, por (6.2.7) e (6.2.5), $x_{k_0+1} \in V$. Dessa maneira, o raciocínio indutivo usual nos conduz à conclusão de que $x_k \in V$ para todo $k \geq k_0$. Mas, pela suposição inicial feita sobre ε_0, o único possível ponto limite da seqüência na bola $\|x - x_*\| \leq \varepsilon_2$ é o próprio x_*. Portanto, $\{x_k\}$ converge para x_*, como queríamos provar.

Vamos demonstrar a segunda parte do teorema. Tomando o desenvolvimento de Taylor em torno de x_k,

$$f(x_k + d_k) = f(x_k) + g(x_k)^T d_k + \frac{1}{2}(d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k) \tag{6.2.8}$$

onde $\lim_{d_k \to 0} \frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} = 0$.

Como $\nabla^2 f(x_k) d_k = -g(x_k)$, substituindo em (6.2.8) temos:

$$f(x_k + d_k) = f(x_k) - \frac{1}{2}(d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k).$$

Suponhamos, por absurdo, que existe um conjunto infinito de índices K_1 tal que, para todo $k \in K_1$,

$$f(x_k + d_k) > f(x_k) + \alpha g(x_k)^T d_k = f(x_k) - \alpha (d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k.$$

Então

$$f(x_k) - \frac{1}{2}(d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k) > f(x_k) - \alpha (d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k\ .$$

Ou seja,

$$r_2(d_k) > \left(\frac{1}{2} - \alpha\right)(d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k\ .$$

Logo,

$$\frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} > \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \frac{(d_k)^T \nabla^2 f(x_k) d_k}{(d_k)^T d_k} \geq \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \lambda_1(k) \tag{6.2.9}$$

onde $\lambda_1(k)$ é o menor autovalor de $\nabla^2 f(x_k)$.

Quando $x_k \to x_*$, $d_k \to 0$ e como os autovalores de uma matriz são funções contínuas das componentes desta matriz, temos que $\lambda_1(k)$ converge a λ_1, o menor autovalor de $\nabla^2 f(x_*)$, que, pela hipótese, é maior que 0.
Logo, passando (6.2.9) ao limite para $k \in K_1$, como como $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$, chegamos a uma contradição. Ela veio de supor que podiam existir infinitos índices não satisfazendo a condição (6.2.1). Portanto, além da convergência para x_*, temos que (6.2.1) se cumpre para todo k suficientemente grande.
QED

Exercício 6.12: Se $f(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + b^T x + c$, com G simétrica e definida positiva, mostre que a partir de qualquer $x_k \in I\!R^n$ a direção de Newton satisfaz Armijo para $\alpha \leq \frac{1}{2}$.

No Teorema 6.2.2 mostramos que, em determinadas condições, o método de Newton globalizado definido nesta seção, acaba coincidindo com o método de Newton local para o sistema $g(x) = 0$, desfrutando, portanto das mesmas propriedades relativas a velocidade de convergência. Vamos resumir tudo isso no seguinte teorema, cuja demonstração limita-se a organizar os resultados anteriores.

Teorema 6.2.3 - Newton Globalizado.
Seja $\{x_k\}$ a seqüência gerada pelo Algoritmo 6.2.1. Então,

(a) Todo ponto de acumulação é estacionário.

(b) Se $f \in C^3(I\!R^n)$, x_* é um ponto limite tal que $\nabla^2 f(x_*) > 0$, $\beta < 1/\|\nabla^2 f(x_*)\|$ e θ é menor que o inverso do número de condição de $\nabla^2 f(x_*)$, então x_k converge para x_* e existe $k_0 \in \mathcal{N}$ tal que para todo $k \geq k_0, t = 1$.

(c) No caso (b), a convergência é quadrática.

Exercício 6.13: Demonstrar o Teorema 6.2.3.

6.3 Métodos quase-Newton

Vimos que a implementação do método de Newton para minimizar funções exige a resolução, em geral via fatoração de Cholesky, do sistema linear

$$\nabla^2 f(x_k) d_k = -g(x_k) \tag{6.3.1}$$

em cada iteração. Às vezes, mais de uma fatoração é necessária para corrigir falta de positividade da matriz Hessiana. Quando não é possível tirar vantagem da estrutura esparsa da matriz, essa fatoração envolve $O(n^3/6)$ operações. Quando n é grande, esse trabalho pode ser intolerável, o que motiva o desenvolvimento de métodos cujo custo por iteração seja $O(n^2)$. Por outro lado, se as derivadas segundas vão ser calculadas manualmente, a probabilidade de erros humanos é considerável, de maneira que o desenvolvimento de algoritmos sem derivadas segundas também se justifica. Mesmo que o cálculo de derivadas segundas não seja um grande problema, por serem fáceis ou pela disponibilidade de programas de diferenciação automática (ver [105]), é possível que o custo de calcular a matriz Hessiana seja muito elevado. Por exemplo, suponhamos que $f(x)$ seja uma soma de (muitos) quadrados:

$$f(x) = \frac{1}{2}\|F(x)\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} f_i(x)^2, \tag{6.3.2}$$

com $F : I\!R^n \to I\!R^m, J(x) = F'(x) \in I\!R^{m\times n}$. Nesse caso,

$$\nabla f(x) = J(x)^T F(x), \quad \text{e} \quad \nabla^2 f(x) = J(x)^T J(x) + \sum_{i=1}^{m} f_i(x)\nabla^2 f_i(x).$$

Sem considerar possível esparsidade, o cálculo do gradiente envolve pelo menos $O(mn)$ operações. Mas o cálculo da Hessiana precisa $O(mn^2)$ produtos apenas para calcular $J(x)^T J(x)$, ou seja, sem contar a somatória onde aparecem as Hessianas das f_i que, freqüentemente, é mais complicada. Logo, se m é grande, a diferença de custo entre uma iteração $O(n^2)$ e a iteração newtoniana pode ser significativa.

No método de Newton globalizado com buscas lineares, introduzido na Seção 2, a maioria das iterações tem a forma $x_{k+1} = x_k - t_k\nabla^2 f(x_k)^{-1} g(x_k)$. Como esse método tem boas propriedades de convergência local, é natural que os métodos quase-Newton que pretendemos definir tentem se parecer com ele tanto quanto possível, porém, barateando o custo. Assim, "a maioria" das iterações quase-Newton será da forma

$$x_{k+1} = x_k - t_k B_k^{-1} g(x_k). \tag{6.3.3}$$

A idéia é tentar que as matrizes B_k sejam aproximações razoáveis das Hessianas. Os métodos secantes conseguem, geralmente, aproximações satisfatórias exigindo que as B_k's satisfaçam a "equação secante", cujo significado geométrico vimos no Capítulo 5 e que, no caso de minimização sem restrições, toma a forma

$$B_{k+1} s_k = y_k \text{ onde } s_k = x_{k+1} - x_k \text{ e } y_k = g(x_{k+1}) - g(x_k). \tag{6.3.4}$$

Uma condição para que um método secante tenha baixo custo é que seja possível obter B_{k+1}^{-1} (ou uma fatoração de B_k) facilmente a partir de B_k, s_k e y_k. "Facilmente" significa, via de regra, com $O(n^2)$ operações. Quase sempre é mais cômodo formular os métodos quase-Newton na forma

$$x_{k+1} = x_k - t_k H_k g(x_k), \tag{6.3.5}$$

com a matriz H_k de (6.3.5) correspondendo a B_k^{-1} de (6.3.3). Dessa maneira, as H_k podem ser interpretadas como aproximações das inversas das Hessianas e a equação secante toma a forma

$$H_{k+1} y_k = s_k. \tag{6.3.6}$$

Como no caso do método de Newton, a globalização dos métodos quase-Newton será um caso particular do Algoritmo 6.1.6 com as direções d_k calculadas como $-H_k g(x_k)$ (ou $-B_k^{-1} g(x_k)$).

Algoritmo 6.3.1 - Secante globalizado.
Sejam $\alpha \in (0,1),\ \beta > 0,\ \theta \in (0,1)$.
Dados x_k, B_k(ou H_k) e $g_k = \nabla f(x_k) \neq 0$,

(1) Resolver

$$B_k d_k = -g_k \ \ (\text{ou } \ d_k = -H_k g_k) \ .$$

(2) Testar as condições

$$\|d_k\| \geq \beta \|g_k\| \quad \text{e} \quad g_k^T d_k \leq -\theta \|g_k\| \ \ \|d_k\|,$$

corrigindo d_k se necessário.

(3) Fazer "backtracking" até que

$$f(x_k + t d_k) \leq f(x_k) + \alpha t g_k^T d_k.$$

(4) Definir $x_{k+1} = x_k + t d_k$, $s_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = g_{k+1} - g_k$ e escolher B_{k+1} tal que $B_{k+1} s_k = y_k$ (ou H_{k+1} tal que $H_{k+1} y_k = s_k$).

A correção para d_k mencionada no Passo 2 é inteiramente arbitrária. Por exemplo, qualquer vetor d_k da forma $-\gamma g(x_k)$, com $\gamma \geq \beta$ satisfará, obviamente, as condições (6.1.4) e (6.1.5). Mas, em casos particulares, correções mais inteligentes podem ser tentadas.

Exercício 6.14: Inventar outras correções para d_k no Passo 2 do Algoritmo 6.3.1, de maneira de aproveitar melhor a informação contida na aproximação B_k (ou H_k).

Vamos introduzir fórmulas que satisfazem () ou () e, portanto, geram métodos secantes. Em $I\!R$, existe uma única possibilidade: $B_{k+1} = y_k/s_k$ ou $H_{k+1} = s_k/y_k$. Em geral, qualquer matriz B_{k+1} cumprindo () pertence à variedade afim $Bs_k = y_k$ em $I\!R^{n\times n}$. Pelo mesmo argumento usado em sistemas não lineares, esta variedade é não vazia e, portanto, tem infinitos elementos se $n \geq 2$.
Por razões que veremos mais adiante, é muito freqüente obter B_{k+1} a partir de B_k mediante uma atualização de posto dois. Nesse caso,

$$B_{k+1} = B_k + \Delta B'_k + \Delta B''_k$$

e como $B_{k+1}s_k = y_k$, segue que

$$(B_k + \Delta B'_k + \Delta B''_k)s_k = y_k$$

ou seja,

$$\Delta B'_k s_k + \Delta B''_k s_k = y_k - B_k s_k \tag{6.3.7}$$

Existem muitas maneiras da equação (6.3.7) ser satisfeita. Por exemplo, se $\Delta B'_k s_k = y_k$ e $\Delta B''_k s_k = -B_k s_k$, e impomos que $B_k, \Delta B'_k$ e $\Delta B''_k$ sejam simétricas, temos a seguinte atualização:

$$\Delta B'_k = \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \qquad \text{e} \qquad \Delta B''_k = -\,\frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}\ .$$

Dessa maneira, obtemos a seguinte fórmula secante:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}\ . \tag{6.3.8}$$

A escolha (6.3.8) é conhecida como *fórmula BFGS*, descoberta independentemente por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno em 1970. É a atualização secante mais popular para minimização sem restrições.

Exercício 6.15: Provar que, na fórmula BFGS,

$$B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1} + \frac{(s_k - B_k^{-1}y_k)s_k^T + s_k(s_k - B_k^{-1}y_k)^T}{s_k^T y_k} - \frac{(s_k - B_k^{-1}y_k)^T y_k s_k s_k^T}{(s_k^T y_k)^2}.$$

Tendo em vista o Exercício 6.15, a formulação dual da fórmula BFGS efetivamente usada é:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)s_k^T + s_k(s_k - H_k y_k)^T}{s_k^T y_k} - \frac{(s_k - H_k y_k)^T y_k s_k s_k^T}{(s_k^T y_k)^2}. \tag{6.3.9}$$

Em (6.3.9) observamos que a obtenção de H_{k+1} a partir de H_k (ou B_{k+1}^{-1} a partir de B_k^{-1}) demanda apenas $O(n^2)$ operações, como desejávamos.

Exercício 6.16: Utilizando a mesma heurística usada na obtenção da fórmula BFGS, mas trabalhando inicialmente na formulação dual (matrizes H), "inventar" a fórmula DFP (introduzida por Davidon em 1959 e estudada por Fletcher e Powell em 1963).

A fórmula BFGS e a DFP têm a propriedade de produzir, geralmente, matrizes definidas positivas e, portanto, direções de descida, que, freqüentemente, não precisarão correção. A condição suficiente para tão interessante propriedade é dada no seguinte teorema.

Teorema 6.3.2
Na fórmula BFGS (6.3.8), se B_k é simétrica definida positiva e $s_k^T y_k > 0$, então B_{k+1} também é simétrica e definida positiva.

Prova: Seja $z \neq 0, z \in I\!R^n$. Então

$$z^T B_{k+1} z = z^T B_k z + \frac{(z^T y_k)^2}{y_k^T s_k} - \frac{(z^T B_k s_k)^2}{s_k^T B_k s_k},$$

onde $z^T B_k z > 0$ e $\dfrac{(z^T y_k)^2}{y_k^T s_k} \geq 0$. Agora, chamando

$$a = z^T B_k z - \frac{(z^T B_k s_k)^2}{s_k^T B_k s_k} = \frac{s_k^T B_k s_k z^T B_k z - (z^T B_k s_k)^2}{s_k^T B_k s_k},$$

temos que, pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, que $a \geq 0$.

Na verdade, $a = 0$ apenas quando z é múltiplo de s_k, mas neste caso, $z^T y_k \neq 0$ e portanto $\dfrac{(z^T y_k)^2}{s_k^T y_k} > 0$. Logo $z^T B_{k+1} z > 0$. **QED**

Exercício 6.17: Enunciar e provar o resultado análogo ao Teorema 6.3.2 para a fórmula DFP.

O significado de $s_k^T y_k > 0$ precisa ser desvendado. Temos $s_k^T y_k = s_k^T (g_{k+1} - g_k) = s_k^T g(x_k + t d_k) - s_k^T g(x_k) = \varphi'(t) - \varphi'(0)$, onde $\varphi(t) = f(x_k + t d_k)$. Ou seja, quando $s_k^T y_k > 0$ o passo que acabou satisfazendo (6.1.3) é tal que $\varphi'(t) > \varphi'(0)$. Em outras palavras, a derivada direcional de f na direção de d_k é maior no ponto x_{k+1} que no ponto x_k. É fácil ver que essa condição é satisfeita automaticamente, por exemplo, se a função f é convexa ao longo da direção d_k.

Tanto a fórmula DFP quanto a BFGS satisfazem outra propriedade importante, que foi bastante destacada nos primórdios dos métodos quase-Newton (ver [70]): quando aplicados à minimização de uma quadrática com Hessiana definida positiva e com o passo t calculado como o minimizador da função ao longo da direção d_k, a convergência ao minimizador da quadrática é obtida em no máximo n iterações. Sabe-se, por outro lado, que a fórmula BFGS é preferível à DFP, o que foi verificado experimentalmente ao longo dos anos, e parcialmente explicado do ponto de vista teórico por Powell e outros. Ver [165] e [157]. A teoria de convergência de algoritmos baseados na fórmula BFGS ainda apresenta pontos não elucidados. O Algoritmo 6.3.3 é uma implementação de um esquema BFGS como caso particular do esquema geral da primeira seção deste capítulo, onde, simplesmente, as direções que não satisfazem (6.1.4) e (6.1.5) são descartadas. Com a geração BFGS é possível observar na prática que esse descarte é extremamente raro.

Algoritmo 6.3.3 - BFGS globalizado.
Sejam $\alpha \in (0,1)$, $\beta > 0$, $\theta \in (0,1)$, $x_0 \in I\!R^n$, $H_0 = H_0^T$, $H_0 > 0$ (p. ex., $H_0 = I$).
Dados x_k, H_k e $g_k = \nabla f(x_k) \neq 0$,

(1) $d_k = -H_k g_k$.

(2) Se $(g_k^T d_k > -\theta \|g_k\| \, \|d_k\|)$, substituir d_k por $-g_k$ e H_k por I. Se $(\|d_k\| < \beta \|g_k\|)$ substituir d_k por $\beta \|g_k\| d_k / \|d_k\|$

(3) Fazer "backtracking" até que

$$f(x_k + td_k) \leq f(x_k) + tg_k^T d_k.$$

(4) $x_{k+1} = x_k + td_k, \quad s_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = g_{k+1} - g_k.$
Se $s_k^T y_k \leq 0$, então $H_{k+1} = H_k$
caso contrário,

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)s_k^T + s_k(s_k - H_k y_k)^T}{s_k^T y_k} \\ &\quad - \frac{(s_k - H_k y_k)^T y_k s_k s_k^T}{(s_k^T y_k)^2}. \end{aligned}$$

Exercício 6.18: Uma outra fórmula secante é obtida projetando-se B_k na variedade $Bs_k = y_k$ segundo a norma de Frobenius (ver exercício 5.3). Determinar esta atualização, conhecida como *primeiro método de Broyden*, mostrando que:

(a) $B_{k+1} = B_k + \dfrac{(y_k - B_k s_k)s_k^T}{s_k^T s_k}.$

(b) $B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1} + \dfrac{(s_k - B_k^{-1} y_k)s_k^T B_k^{-1}}{s_k^T B_k^{-1} y_k}$, ou seja,

$H_{k+1} = H_k + \dfrac{(s_k - H_k y_k)s_k^T H_k}{s_k^T H_k y_k}.$

(c) $\|B_{k+1} - B_k\|_2 \leq \|B - B_k\|_2$ para toda $B \in I\!R^{n\times n}$ tal que $Bs_k = y_k$.

Exercício 6.19: Para $A \in I\!R^{n\times n}$, mostrar que $\frac{1}{2}(A + A^T)$ é a matriz simétrica mais próxima de A na norma de Frobenius.

Exercício 6.20: Seguindo a mesma idéia do primeiro método de Broyden (Exercício 6.18), mas impondo também simetria, encontrar a *fórmula PSB* ("Powell symmetric Broyden", [162]):

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)s_k^T + s_k(y_k - B_k s_k)^T}{s_k^T s_k} - \frac{(y_k - B_k s_k)^T s_k s_k s_k^T}{(s_k^T s_k)^2}.$$

Exercício 6.21:

(a) Construir a fórmula PSB tipo H.

(b) Infelizmente, a atualização PSB nem sempre gera matrizes definidas positivas. Mostrar que numa vizinhança de x_* tal que $\nabla^2 f(x_*) > 0$, se $B_k > 0$, B_{k+1} dada pela fórmula PSB também é definida positiva.

De maneira análoga ao que fizemos para obter a fórmula BFGS, também podemos determinar uma atualização secante simétrica e de posto unitário. Queremos $B_{k+1}s_k = y_k$, onde $B_{k+1} = B_k + \Delta B_k$. Então, $(B_k + \Delta B_k)s_k = y_k$, ou seja $\Delta B_k s_k = y_k - B_k s_k$. Para que haja simetria, fazemos:

$$\Delta B_k = \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \ .$$

Obtemos assim a fórmula chamada *Atualização simétrica de posto um*,

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \ . \qquad (6.3.10)$$

Exercício 6.22: Mostrar que a formulação dual para a atualização simétrica de posto um é dada por:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k} \ .$$

A atualização simétrica de posto um não gera necessariamente matrizes definidas positivas, e, tampouco há garantia de que o denominador de (6.3.10) seja diferente de zero. Isto sugere que esta atualização é propensa a severa instabilidade numérica. Entretanto, os resultados práticos obtidos são surpreendentemente bons. A descoberta de uma teoria explicativa para o comportamento desta fórmula ainda constitui um desafio. A atualização de posto um foi reinventada várias vezes por diversos autores e já aparecia no artigo pioneiro de Davidon em 1959. Um resultado muito interessante para funções quadráticas é dado no seguinte teorema.

Teorema 6.3.4
Se $f(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + b^T x + c$, $G > 0$, *se a fórmula (6.3.10) está bem definida em todas as iterações, se os incrementos são linearmente independentes e se o passo* $t \equiv 1$ *é usado para todo* k, *então* $H_n = G^{-1}$, *e portanto,* x_{n+1} *é*

a solução.

Exercício 6.23: Provar o Teorema 6.3.4 (ver, por exemplo, [122]).

Chegamos ao ponto em que é necessário compatibilizar os métodos quase-Newton "locais", estudados no Capítulo 5, que, via de regra, tem convergência superlinear, com a globalização introduzida nos algoritmos 6.3.1 e 6.3.3. Esses algoritmos são casos particulares do Algoritmo 6.1.6, e, portanto, são globalmente convergentes no sentido de que todo ponto limite de uma seqüência gerada por qualquer um deles deve ser estacionário. No entanto, essa propriedade global está baseada nas salvaguardas tomadas para que (6.1.4) e (6.1.5) sejam satisfeitas, e não nas características próprias dos métodos secantes. Como no caso do método de Newton globalizado, seria interessante que, em circunstâncias bem definidas, as iterações puramente locais e as globais fossem as mesmas, para que o método global possa desfrutar da velocidade de convergência do local. No seguinte teorema, resolvemos parcialmente esse problema.

Teorema 6.3.5
Seja $x_* \in I\!R^n$ tal que $\nabla f(x_*) = 0$, $f \in C^3(I\!R^n)$, $\nabla^2 f(x_*) > 0$. Suponhamos que x_* é um ponto limite da seqüência infinita $\{x_k\}$, gerada pelo Algoritmo 6.3.1 com $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$, que as condições (6.1.4) e (6.1.5) são sempre satisfeitas por $d_k = -B_k^{-1} g(x_k)$ (ou $d_k = -H_k g(x_k)$ na formulação dual), as matrizes B_k^{-1} (H_k) estão uniformemente limitadas ($\|B_k^{-1}\| \leq M$ ou $\|H_k\| \leq M$ para todo k) e que $\lim_{k\to\infty} \frac{\|[B_k - \nabla^2 f(x_*)]d_k\|}{\|d_k\|} = 0$ (condição Dennis-Moré). Então,
(a) A seqüência $\{x_k\}$ converge para x_*;
(b) existe $\varepsilon > 0$ tal que, se $\|x_k - x_*\| \leq \varepsilon$,

$$f(x_k + d_k) \leq f(x_k) + \alpha g_k^T d_k,$$

(c) a convergência é superlinear.

Prova: Pela hipótese de limitação uniforme de $\|B_k^{-1}\|$ (ou $\|H_k\|$) a convergência de $\{x_k\}$ para x_* segue exatamente como no Teorema 6.2.2. Suponhamos, por um momento, que (b) se satisfaz. Então, para k suficientemente grande, não é necessário "backtracking" e $t = 1$ é sempre o passo aceito. Assim, para esses valores de k, o algoritmo é um quase-Newton puro que satisfaz a condição Dennis-Moré. Portanto, a convergência superlinear resulta do Teorema Dennis-Moré, provado no Capítulo 5.

Em conseqüência, somente precisamos provar (b).
A expansão de Taylor para f em torno de x_k é dada por:

$$f(x_k + d_k) = f(x_k) + g_k^T d_k + \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k) \tag{6.3.11}$$

onde $\lim_{d_k \to 0} \frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} = 0$.
Como $B_k d_k = -g_k$, segue que $g_k^T d_k = -d_k^T B_k d_k$ e, substituindo em (6.3.11) temos:

$$f(x_k + d_k) = f(x_k) - d_k^T B_k d_k + \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k) \ . \tag{6.3.12}$$

Suponhamos por absurdo, como no Teorema (6.2.9), que existe um conjunto infinito de índices K_1 tal que, para todo $k \in K_1$,

$$f(x_k + d_k) > f(x_k) + \alpha g_k^T d_k = f(x_k) - \alpha d_k^T B_k d_k \ .$$

Então,

$$f(x_k) - d_k^T [B_k - \nabla^2 f(x_k)] d_k - \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k + r_2(d_k)$$

$$> f(x_k) - \alpha d_k^T [B_k - \nabla^2 f(x_k)] d_k - \alpha d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k \ .$$

Ou seja,

$$\frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} > (1-\alpha) \frac{d_k^T}{\|d_k\|} (B_k - \nabla^2 f(x_k)) \frac{d_k}{\|d_k\|} + \left(\frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k}{d_k^T d_k} \ .$$

Portanto,

$$\frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} \geq (1-\alpha) \frac{d_k^T}{\|d_k\|} (B_k - \nabla^2 f(x_k)) \frac{d_k}{\|d_k\|} + \left(\frac{1}{2} - \alpha \right) \lambda_1(k) \ . \tag{6.3.13}$$

Tomando limites para $k \in K_1$ em ambos membros de (6.3.13), usando a condição Dennis-Moré da hipótese do teorema, e a continuidade dos autovalores, obtemos

$$0 = \lim_{k \in K_1} \frac{r_2(d_k)}{\|d_k\|^2} \geq (\frac{1}{2} - \alpha) \lambda_1,$$

onde λ_1 é o menor autovalor de $\nabla^2 f(x_*)$. Isto é uma contradição, porque, por hipótese $\alpha < 1/2$ e a Hessiana em x_* é definida positiva. **QED**

O resultado acima não prova a superlinearidade dos algoritmos 6.3.1 ou 6.3.3. Como vimos no Capítulo 5, a condição Dennis-Moré pode ser deduzida da equação secante e da propriedade $\lim_{k\to\infty} \|B_{k+1} - B_k\| = 0$, mas esta propriedade precisa ser provada para métodos secantes específicos. No entanto, o Teorema 6.3.5 provoca o sentimento de que, em muitos casos, os métodos de minimização caracterizados pela condição secante serão superlinearmente convergentes.

6.4 Métodos de Newton truncados com busca linear

Vimos que, para calcular a direção de busca, o método de Newton precisa resolver um sistema linear, o que demanda $O(n^3/6)$ operações no caso denso, e que o cálculo da direção nos quase-Newton envolve $O(n^2)$ operações. Quando n é grande e a Hessiana é esparsa, o método de Newton pode ser implementado através de fatorações de Cholesky que aproveitem a esparsidade da matriz, armazenando apenas os elementos não-nulos. Também existem implementações de métodos quase-Newton para problemas de grande porte. Nesse caso, em vez de armazenar as matrizes H_k (da formulação dual) são guardados os últimos vetores que contribuem para a definição da atualização, descartando os antigos. Essas implementações se dizem "de memória limitada". Ver [157].

A última alternativa é usar um método iterativo para resolver o sistema linear (6.3.1). Neste caso, o método geralmente recomendado é o de gradientes conjugados, devido à matriz ser simétrica e, muitas vezes, definida positiva. Como no caso de resolução de sistemas, falaremos, neste caso, de métodos de Newton truncados. No entanto, os métodos de Newton truncados com busca linear não desfrutam de grande prestígio no contexto da minimização irrestrita. A razão é, provavelmente, que um tipo diferente de globalização, baseado em *regiões de confiança*, se adapta melhor à resolução iterativa de (6.3.1) que as buscas lineares. Por isso, nos limitaremos aqui a definir um possível método de Newton truncado com buscas lineares e deixaremos suas propriedades para serem analisadas pelo leitor.

Algoritmo 6.4.1 - Newton truncado globalizado.
Sejam $\alpha \in (0,1)$, $\beta > 0$, $\theta \in (0,1)$ e $\eta_k \in (0,1)$ para todo $k = 0, 1, 2, \ldots$.

(1) Dado $x_k \in I\!R^n$, $\nabla f(x_k) \neq 0$, obter d_k satisfazendo:

$$\frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k + g(x_k)^T d_k < 0$$

e

$$\|\nabla^2 f(x_k) d_k + \nabla f(x_k)\| \leq \eta_k \|g(x_k)\| \ .$$

(2) Se o cálculo de d_k nas condições acima não é possível num tempo razoável, ou $\|d_k\| < \beta \|\nabla f(x_k)\|$, ou $\nabla f(x_k)^T d_k > -\theta \|\nabla f(x_k)\| \, \|d_k\|$ substituir d_k por $-\nabla f(x_k)$.

(3) Fazer "backtracking" até que

$$f(x_k + t d_k) \leq f(x_k) + t \nabla f(x_k)^T d_k \ .$$

(4) $x_{k+1} = x_k + t d_k$ e voltar para (1).

Exercício 6.26: Analise as propriedades do Algoritmo 6.4.1.