

RELATÓRIO DE PESQUISA

Estudo do desempenho de métodos para minimização irrestrita com controle de passo¹

Profa. Dra. Sandra Augusta Santos
Departamento de Matemática Aplicada - IMECC - Unicamp
<http://www.ime.unicamp.br/~sandra>

Larissa Oliveira Xavier - R.A. 009069
Estudante de Graduação - DMA - IMECC - Unicamp
larixavier@yahoo.com.br

Resumo

Neste relatório apresentamos um estudo teórico-prático de métodos locais para minimização irrestrita com controle de passo. A liberdade inerente a estes métodos é explorada por meio das escolhas para a direção de descida e o tamanho do passo. As direções são tomadas com base no método do gradiente e em uma nova proposta de direção. Para o tamanho do passo, além dos métodos puros (passo completo) e do passo ótimo no caso do gradiente em problemas quadráticos, analisamos o desempenho do passo espectral de Barzilai e Borwein para o método do gradiente e de passos aleatórios uniformemente gerados. O ponto de partida é a compreensão dos métodos e das diferentes possibilidades para o tamanho do passo em problemas quadráticos.

Apresentamos também um conjunto extensivo de testes com problemas de quadrados mínimos não lineares. Para estes testes, além do método do gradiente com bissecção e com os passos propostos por Barzilai e Borwein, utilizamos o método de Gauss-Newton com passo puro e com bissecção. Propomos também uma modificação a partir dos passos propostos por Barzilai e Borwein, originando duas novas escolhas para o tamanho de passo. Para a nova proposta de direção utilizamos algumas modificações visando robustez, entre as quais a busca linear não monótona de Grippo, Lampariello e Lucidi. A proposta de Dai, Yuan e Yuan para uma outra escolha de passo no método de máxima descida também é apresentada. Este estudo proporciona interpretações, via interpolação, para o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein, para um dos novos passos propostos e para a nova direção, possibilitando também a concepção de um novo passo e de outra direção.

Para os testes computacionais o ambiente de programação é o *Matlab*. A análise de desempenho é feita via *performance profile*, conforme o trabalho de Dolan e Moré. Apresentamos ainda os resultados da submissão eletrônica de alguns problemas ao NEOS-server, com a implementação das funções objetivo em *Fortran*.

Palavras-chave Minimização irrestrita; máxima descida; busca linear; Barzilai-Borwein; problemas quadráticos; quadrados mínimos não lineares.

¹Apoios FAPESP 02/13486-4 e CNPq 300206/96-8.

1 Introdução

O problema considerado em nosso estudo consiste em

$$\min f(x), \quad \text{com } f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \text{ e } f \in C^1.$$

Um minimizador local para f é um ponto x^* tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para x em uma vizinhança de x^* , ou seja, existe $\varepsilon > 0$ tal que $f(x^*) \leq f(x)$ para todo x tal que $\|x^* - x\| < \varepsilon$.

Uma condição necessária para x^* ser um minimizador local é

$$\nabla f(x^*) = 0.$$

Para um problema de minimização irrestrita com função objetivo f , podemos utilizar um modelo de algoritmo geral que consiste basicamente em três etapas:

Modelo de Algoritmo Geral para Minimização Irrestrita

- Passo 1-Escolha da direção de descida:
Tomar $d^k \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla^T f(x^k)d^k < 0$.
- Passo 2-Determinação do tamanho do passo:
Calcular $\lambda_k > 0$ tal que $f(x^k + \lambda_k d^k) < f(x^k)$ (Busca Linear).
- Passo 3-Tomar $x^{k+1} = x^k + \lambda_k d^k$.

Neste trabalho apresentamos algumas escolhas para direção de descida e determinação do passo, comparando os métodos em testes com problemas quadráticos e de quadrados mínimos não lineares. Na seção 2 apresentamos os métodos utilizados para problemas com função objetivo quadrática. O primeiro método abordado é o de máxima descida, com o qual utilizamos o passo determinado por busca linear exata, os passos propostos por Barzilai e Borwein em [1] e um passo gerado aleatoriamente, proposto por Raydan e Svaiter em [11]. Apresentamos também outro método sugerido em [11] denominado Cauchy-Barzilai-Borwein, além de uma nova direção proposta. Finalizamos a seção 2 com os testes de problemas quadráticos, comparando o desempenho dos métodos. Na seção 3 apresentamos o problema de quadrados mínimos não lineares, fazendo a conexão com o problema de minimização irrestrita, e destacando as estruturas do vetor gradiente e da matriz Hessiana da função objetivo. Para este tipo de problema utilizamos o método de máxima descida com bissecção e com os passos propostos por Barzilai e Borwein, além do método de Gauss-Newton com passo puro e com bissecção. Estes métodos estão apresentados na seção 3.1 juntamente com algumas modificações para os passos propostos por Barzilai e Borwein, das quais são originados dois novos passos. Trabalhamos também com um modelo de busca não monótona [6] para a nova direção proposta, visando a convergência global do método. Ainda nesta seção introduzimos a proposta de Dai, Yuan e Yuan [2] para uma outra escolha de passo no método de máxima descida. Este estudo proporciona interpretações via interpolação para o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein, para um dos novos passos propostos e para a nova direção, possibilitando

também a concepção de um novo passo e de outra direção.

Finalizamos a seção 3 com um conjunto de problemas-teste extraídos de Moré, Garbow e Hillstom [10], comparando o desempenho dos métodos através de gráficos de *performance profile* [4], além da submissão eletrônica de alguns problemas ao NEOS-server.

2 Problemas quadráticos

Quadráticas são polinômios com n variáveis contendo termos até segunda ordem. A minimização de quadráticas é um dos problemas mais simples da otimização. O ajuste de parâmetros relacionados linearmente com os dados, por exemplo, recai em um problema quadrático ao ser modelado pela minimização da soma dos quadrados dos erros. A minimização de quadráticas também é utilizada como subproblema em algoritmos para problemas mais gerais.

Os métodos utilizados para problemas quadráticos neste trabalho são detalhados a seguir.

2.1 Método de máxima descida com busca linear exata (MDBLE)

Para a determinação dos métodos, a primeira direção escolhida para o passo 1 do algoritmo geral é $d^k = -g^k$, onde $g^k = \nabla f(x^k)$, o que caracteriza o *Método de Máxima Descida (MMD)*. Para este método, trabalhamos com algumas escolhas para o tamanho do passo.

A primeira escolha é obter o passo através de uma busca linear exata para o caso de funções objetivo quadráticas $f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + b^T x + c$, cujo gradiente é dado por $g(x) = Hx + b$, onde $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é a matriz Hessiana de f . A busca linear exata consiste em obter λ_k no passo 2 do algoritmo geral tal que

$$\lambda_k = \arg \min f(x^k + \lambda d^k) .$$

Para o caso do método de máxima descida com busca linear exata (MDBLE) temos:

$$\lambda_k = \frac{(g^k)^T g^k}{(g^k)^T H g^k} . \quad (1)$$

2.2 Os passos propostos por Barzilai e Borwein

A segunda escolha para o tamanho do passo, utilizada com o método de máxima descida, é a proposta por Barzilai e Borwein em [1] para problemas quadráticos e estendida por Raydan [12] para problemas irrestritos gerais. A motivação para se obter tais passos é fazer uma aproximação para a matriz Hessiana $H_k = \nabla^2 f(x^k)$ da função objetivo f e também

para sua inversa H_k^{-1} por matrizes escalares $A_k = \alpha_k I$ e $B_k = \beta_k I$ respectivamente, determinando α_k e β_k através das condições:

$$g^k = L(x^k) \quad (2)$$

$$\text{e } g^{k-1} = L(x^{k-1}), \quad (3)$$

onde $L(x) = g(x^k) + H_k(x - x^k)$ é a aproximação linear do gradiente da função f por um polinômio de Taylor em torno de x^k . Notamos que (2) é sempre válida.

Chamando $y^{k-1} = g(x^k) - g(x^{k-1})$ e $s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$, pela equação (3) temos que as constantes α e β são dadas, a cada iteração, por:

$$\alpha_k = \frac{(s^{k-1})^T y^{k-1}}{(s^{k-1})^T s^{k-1}} \quad (4)$$

e

$$\beta_k = \frac{(s^{k-1})^T y^{k-1}}{(y^{k-1})^T y^{k-1}}. \quad (5)$$

Assim temos definidos os passos propostos por Barzilai e Borwein ($\frac{1}{\alpha_k}$ e β_k) para serem utilizados no passo 2 do algoritmo geral, com funções objetivo gerais.

Para o caso de uma função objetivo quadrática, como $y^{k-1} = H s^{k-1}$, temos que

$$\alpha_k = \frac{(s^{k-1})^T H s^{k-1}}{(s^{k-1})^T s^{k-1}} \quad (\text{BB1}) \quad \text{e} \quad \beta_k = \frac{(s^{k-1})^T H s^{k-1}}{(s^{k-1})^T H^2 s^{k-1}} \quad (\text{BB2}).$$

2.3 Nova direção proposta (ND)

Estudando os passos propostos por Barzilai e Borwein, tivemos a motivação de realizar uma modificação na escolha da matriz que aproxima a matriz Hessiana.

Fazendo a aproximação $L(x) = g^k + H_k(x - x^k)$ para o gradiente da função objetivo por um polinômio de Taylor de primeira ordem em torno de x^k e impondo $L(x^{k+1}) = 0$, resolvemos em cada iteração o sistema linear

$$H_k s^k = -g^k, \quad (6)$$

onde $s^k = x^{k+1} - x^k$. Para os passos propostos por Barzilai e Borwein, aproximamos a matriz H_k por A_k ou, para o segundo passo, aproximamos a matriz H_k^{-1} por B_k , onde A_k e B_k são matrizes escalares ($A_k = \alpha_k I$ e $B_k = \beta_k I$). Com estas aproximações, posteriormente teríamos que resolver um sistema sobredeterminado via quadrados mínimos para obter as expressões (4) e (5). Com o objetivo de resolver um sistema que não fosse sobredeterminado, aproximamos a matriz Hessiana por uma matriz diagonal em cada iteração:

$$H_k \simeq M_k = \text{diag}(\alpha^k)$$

onde $(\alpha^k)^T = (\alpha_1^k, \alpha_2^k, \dots, \alpha_n^k)$.

Após fazer esta aproximação, do sistema (6) obtemos:

$$M_k s^k = -g^k. \quad (7)$$

Como condição para a aproximação $H_k \simeq M_k$ vamos impor

$$L(x^{k-1}) = g^{k-1} ,$$

obtendo o sistema:

$$M_k s^{k-1} = y^{k-1} , \quad (8)$$

onde $s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$ e $y^{k-1} = g^k - g^{k-1}$.

Este sistema apresenta n equações e n incógnitas $(\alpha_1^k, \alpha_2^k, \dots, \alpha_n^k)$ e pode ser facilmente resolvido, de onde obtemos:

$$\alpha_i^k = \frac{y_i^{k-1}}{s_i^{k-1}} , \text{ para todo } i = 1, \dots, n. \quad (9)$$

Assim, de (9) e de (7) obtemos uma nova direção s^k tal que:

$$s_i^k = -\frac{1}{\alpha_i^k} g_i^k = -\frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} g_i^k .$$

Então, com esta nova direção, a partir do ponto x^k temos:

$$x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} g_i^k , \quad (10)$$

onde x_i^{k+1} é a i -ésima componente de x^{k+1} .

Um problema evidente nesta nova direção é a possibilidade de, em alguma iteração, uma componente y_i^{k-1} de y^{k-1} ser igual a zero. Quando isso ocorre, ao implementar o algoritmo impusemos a salvaguarda $\frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} = 1$.

Outro problema ocorre quando temos $s_i^{k-1} = 0$. Este fato resulta na impossibilidade de alteração para a componente i do vetor x^{k+1} nas iterações seguintes, já que $x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} g_i^k$ e $s_i^k = x_i^{k+1} - x_i^k$. Assim, se temos $s_i^{k-1} = 0$, então $x_i^k = x_i^{k+1} = x_i^{k+2} = \dots$ e, se $x_i^k \neq x_i^*$, poderemos não ter uma boa estimativa para o ponto crítico. Para evitar este tipo de problema, na implementação do algoritmo, quando ocorre $s_i^{k-1} = 0$, impusemos a salvaguarda

$$\frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} g_i^k = \|g^k\| . \quad (11)$$

O termo $\|g^k\|$ foi escolhido por conter uma medida da otimalidade, com o objetivo de manter uma proporcionalidade entre o que substituirá o termo $\frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} g_i^k$ e a distância entre x^k e x^* . Como $\|g^k\|$ converge para zero quando x^k converge para x^* , para pontos mais próximos de x^* teremos um acréscimo menor em x_i^k do que teríamos se x^k estivesse mais afastado de x^* , quando $s_i^{k-1} = 0$.

2.4 Método de máxima descida aleatório (MDA)

A primeira proposta analisada para métodos de minimização irrestrita para problemas quadráticos, apresentada por Raydan e Svaiter, é o *método de máxima descida aleatório*, denominado em [11] por *Randomly Relaxed Cauchy method*. A idéia desse tipo de método é, mantendo-se a direção de máxima descida, permitir uma liberdade de escolha para o tamanho de passo. Para o caso de funções objetivo quadráticas, o passo é escolhido em uma região que contém o passo determinado pela busca linear exata.

Para o método de máxima descida com busca linear exata temos:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k g^k, \quad (12)$$

onde λ_k é dado por (1).

No método de máxima descida aleatório é introduzido um parâmetro θ_k que produz uma variação na escolha do tamanho do passo. Assim para cada iteração temos:

$$x^{k+1} = x^k - \theta_k \lambda_k g^k. \quad (13)$$

Se $\theta_k = 1$, então temos o método de máxima descida com busca linear exata dado por (12). Para garantir o decréscimo no valor da função objetivo devemos impor que $f(x^{k+1}) < f(x^k)$.

Como a função objetivo é quadrática, $f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + b^T x + c$ e $g^k = \nabla f(x^k) = Hx^k + b$, temos que

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) &= \frac{1}{2}(x^k - \theta_k \lambda_k g^k)^T H(x^k - \theta_k \lambda_k g^k) + b^T(x^k - \theta_k \lambda_k g^k) + c \\ &= f(x^k) - \theta_k \lambda_k (x^k)^T H g^k + \frac{1}{2} \theta_k^2 \lambda_k^2 (g^k)^T H g^k - \theta_k \lambda_k b^T g^k \\ &= f(x^k) + \theta_k \lambda_k \left[\left(\frac{1}{2} \theta_k g^k - Hx^k - b \right)^T g^k \right] \\ &= f(x^k) + \theta_k \lambda_k \left[\left(\frac{1}{2} \theta_k - 1 \right) (g^k)^T g^k \right] \end{aligned}$$

Como $(g^k)^T g^k > 0$ e $\lambda_k > 0$, se H é positiva definida, então para que $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ devemos ter $\theta_k (\frac{1}{2} \theta_k - 1) < 0$, ou seja, $0 < \theta_k < 2$. Assim, o método de máxima descida aleatório é definido escolhendo-se θ_k aleatoriamente no intervalo $(0, 2)$.

2.5 Método Cauchy-Barzilai-Borwein (CBB)

Um outro método foi proposto por Raydan e Svaiter em [11] e denominado *método Cauchy-Barzilai-Borwein*.

Para esta nova proposta foram combinadas idéias do método de Barzilai e Borwein e do método de máxima descida com busca linear exata.

O primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein consiste em tomar $\frac{1}{\alpha_k}$, com α_k dado por (4) onde, para o caso quadrático $y^{k-1} = Hs^{k-1}$, e em cada iteração temos $x^{k+1} = x^k - \frac{1}{\alpha_k} g^k$.

Como $s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$, então $s^{k-1} = -\frac{1}{\alpha_{k-1}}g^{k-1}$ e

$$\frac{1}{\alpha_k} = \frac{(s^{k-1})^T s^{k-1}}{(s^{k-1})^T H s^{k-1}} = \frac{(\alpha_{k-1})^2 (g^{k-1})^T g^{k-1}}{(\alpha_{k-1})^2 (g^{k-1})^T H g^{k-1}} = \lambda_{k-1} .$$

Portanto, em cada iteração do método de Barzilai e Borwein, o passo escolhido é equivalente ao passo obtido através de uma busca linear exata na iteração anterior.

O novo método proposto utiliza este fato aproveitando o mesmo passo duas vezes.

Teoricamente, é criado um ponto intermediário z^k através de uma iteração do método de máxima descida com busca linear exata:

$$z^k = x^k - \lambda_k g^k . \quad (14)$$

A partir de z^k computa-se uma iteração do método de máxima descida com o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein calculado com esse ponto intermediário:

$$x^{k+1} = z^k - \lambda_k g(z^k) .$$

Mas $g(z^k) = H z^k + b = g^k - \lambda_k H g^k$. Assim temos que

$$x^{k+1} = z^k - \lambda_k g^k + \lambda_k^2 H g^k = x^k - 2\lambda_k g^k + \lambda_k^2 H g^k .$$

Chamando $h^k = H g^k$ temos em cada iteração:

$$\lambda_k = \frac{(g^k)^T g^k}{(g^k)^T h^k} \quad (15)$$

e

$$x^{k+1} = x^k - 2\lambda_k g^k + \lambda_k^2 h^k , \quad (16)$$

o que determina o método Cauchy-Barzilai-Borwein. Como este método utiliza em cada iteração informações de duas iterações dos outros métodos, espera-se um melhor desempenho quando comparado com MDBLE, BB1 e BB2, o que será verificado nos testes da próxima seção.

2.6 Testes computacionais

Inicialmente faremos uma comparação entre os métodos para problemas com função objetivo quadrática $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Em seguida analisaremos o desempenho dos métodos para problemas de maior dimensão, com uma estrutura diagonal para a matriz Hessiana e componentes geradas aleatoriamente em um intervalo pré-definido.

Para os problemas bidimensionais, como critério de parada, impusemos que o processo se repita até que $\|\nabla f(x^k)\| \leq 10^{-7}$ ou que o número máximo de iterações 50 seja atingido. Como os métodos com os passos propostos por Barzilai e Borwein e com a nova direção

exigem dois pontos iniciais para o início do processo, para uniformizar o critério de comparação, fizemos a primeira iteração com a busca linear exata para obtermos o segundo ponto. Os resultados estão apresentados na tabela 1.

Tabela 1. Resultados dos problemas quadráticos com H positiva definida

Problema				Número de iterações					
H	b	c	x^1	MDBLE	BB 1	BB 2	ND	CBB	MDA
[2 0;0 200]	[0;0]	0	[100;1]	50	50	10	2	38	50
[2 -1;-1 2]	[0;0]	0	[3;1]	24	11	9	3	5	26
[2 0;0 4]	[0;0]	0	[10;1]	10	6	8	2	3	21
[2 0;0 4]	[0;0]	0	[10;5]	18	18	12	2	9	21
[2 1;1 4]	[1;-1]	1	[5;1]	23	11	9	3	5	26
[4 0;0 6]	[3;1]	2	[0;0]	9	6	7	2	3	20
[2 1;1 2]	[2;1]	5	[0;0]	15	8	9	3	4	24
[2 1;1 20]	[1;1]	0	[0;0]	50	16	10	3	6	46
[2 -1;-1 2]	[0;0]	0	[2;5]	26	11	9	3	5	28
[2 0;0 20]	[0;0]	0	[1;5]	7	6	6	2	3	50
[2 0;0 20]	[0;0]	0	[5;1]	50	11	9	2	4	50
[2 0;0 2]	[-5;5]	0	[0;0]	1	1	1	1	1	20
[2 0;0 200]	[-10;-1]	0	[0;0]	50	8	8	2	4	50
[2 0;0 20]	[-10;-1]	0	[0;0]	15	6	8	2	3	50
[2 0;0 4]	[-10;-1]	0	[0;0]	8	6	6	2	3	21
[2 0;0 20]	[-5;5]	0	[0;0]	50	50	10	2	37	36
[2 0;0 200]	[-5;5]	0	[0;0]	50	50	9	2	37	50
[2 0;0 2]	[-10;-1]	0	[0;0]	1	1	1	1	1	20

Para os 18 testes apresentados, verificamos a rápida convergência para a nova direção proposta, convergindo na maioria dos casos em apenas duas iterações, sendo que na primeira iteração é feita uma busca linear exata para a obtenção do segundo ponto. A salvaguarda para a nova direção não foi ativada nenhuma vez.

Os passos propostos por Barzilai e Borwein mostram-se comparáveis entre si, sendo que em 9 testes o segundo passo de Barzilai e Borwein convergiu mais rápido do que o primeiro passo. Em 4 testes obtivemos a convergência mais rápida do primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein. E em 5 testes obtivemos o mesmo número de iterações para os dois passos. Em 6 testes o método do gradiente com busca linear exata atingiu o número máximo de iterações.

Em geral, os passos propostos por Barzilai e Borwein convergem mais rápido do que o passo obtido com busca linear exata, provavelmente pela utilização de informações de segunda ordem da função para os passos de Barzilai e Borwein.

Verificamos que o método Cauchy-Barzilai-Borwein supera o método de máxima descida com busca linear exata e com o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein em todos os problemas testados.

Já o método de máxima descida aleatório mostrou-se mais eficiente que MDBLE apenas duas vezes e superou BB1, BB2 e CBB apenas uma vez.

Para este conjunto de testes observamos o melhor desempenho da nova direção proposta quando comparada aos outros métodos.

Por esta nova direção apresentar informações de segunda ordem quando feita a aproximação para a matriz Hessiana, obtivemos, como no caso dos passos propostos por Barzilai e Borwein, uma convergência mais rápida do que a do método do gradiente com busca linear exata. Além disso, como usamos mais informações do que na dedução dos passos propostos por Barzilai e Borwein, já que aproximamos a matriz Hessiana por uma matriz diagonal ao invés de uma matriz escalar, este fato resultou em uma convergência mais rápida para esta nova direção quando comparada com BB1, BB2 e CBB.

Um fato curioso percebido ao acompanharmos as saídas numéricas com os resultados dos testes foi a igualdade do tamanho dos passos nas iterações k e $k+2$ do método do gradiente com busca linear exata. Um exemplo deste comportamento pode ser visto na tabela 2, para um problema quadrático com Hessiana definida positiva.

Tabela 2. $H = [2 \ 0; 0 \ 20]$, $b = [0, 0]^T$, $c = 0$ e $x^1 = [1, 5]^T$

k	$f(x^k)$	$\ \nabla f(x^k)\ $	λ_k
1	2.5100000000000000e+002	1.000199980003999e+002	5.001799928002880e-002
2	8.099676012959481e-001	1.800287952489099e+000	40982071713147408e-001
3	2.613735120116261e-003	3.227607882948753e-001	5.001799928002880e-002
4	8.434425361210619e-006	5.809461810835764e-003	4.982071713147409e-001
5	2.721757481326725e-008	1.041536978038330e-003	5.001799928002881e-002
6	8.783009475934728e-011	1.874691572806128e-005	40982071713147411e-001
7	2.834244269873318e-013	3.361000827739975e-006	5.001799928002880e-002
8	9.146000130502119e-016	6.049559507551593e-008	—

No método do gradiente com busca linear exata, duas direções consecutivas são ortogonais, ou seja, $(g^k)^T(g^{k+1}) = 0$, para todo k .

Logo g^{k+1} é perpendicular a g^k e também a g^{k+2} . Para $g^k \in \mathbb{R}^2$, teremos então g^k e g^{k+2} com a mesma direção. Assim seus vetores unitários correspondentes serão os mesmos

$$\frac{g^k}{\|g^k\|} = \frac{g^{k+2}}{\|g^{k+2}\|}$$

ou seja,

$$g^k = \frac{\|g^k\|}{\|g^{k+2}\|} g^{k+2} \quad . \quad (17)$$

Com a busca linear exata para funções quadráticas temos o passo:

$$\lambda_k = \frac{(g^k)^T g^k}{(g^k)^T H g^k} \quad . \quad (18)$$

Substituindo (17) em (18) e chamando $\frac{\|g^k\|}{\|g^{k+2}\|} = \xi$, temos:

$$\lambda_k = \frac{(\xi(g^{k+2})^T)(\xi g^{k+2})}{(\xi(g^{k+2})^T)H(\xi g^{k+2})} \quad .$$

Como ξ é um escalar, temos:

$$\lambda_k = \frac{\xi^2 (g^{k+2})^T g^{k+2}}{\xi^2 (g^{k+2})^T H g^{k+2}} = \lambda_{k+2} \quad ,$$

comprovando assim a igualdade dos passos nas iterações k e $k + 2$ para o método do gradiente com busca linear exata para problemas bidimensionais.

Um outro exemplo bidimensional testado foi a função $f(x) = \frac{1}{2}x^T H x$, com a matriz positiva definida $H = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$. Com este teste verificamos um resultado importante: a nova direção pode não ser de descida em alguma iteração.

Com o ponto inicial $x^1 = (-6.1, 5.1)^T$ temos os resultados da tabela 3 para a nova direção.

Tabela 3. Resultados do problema bidimensional para a nova direção

k	x^k	$f(x^k)$	$(s^k)^T g^k$
1	$(-6.1, 5.1)^T$	58.1200	—
2	$(-3.5714, 0.0071)^T$	12.7293	3.6115e+003
3	$(-510.2000, 1.0184)^T$	2.5979e+005	-5.1957e+005
4	$(0, -1.7764e-015)^T$	6.3109e-030	—

Pelos resultados da tabela 3 notamos que s^2 não é uma direção de descida, já que $(s^2)^T g^2 > 0$. Do segundo para o terceiro ponto percebemos um grande crescimento do valor da função objetivo. Porém, este fato não comprometeu a convergência do método, com o decréscimo do valor da função objetivo para $6.3109 * 10^{-30}$ no ponto final.

O próximo conjunto de testes apresentado é para problemas de dimensão maior. Para isto utilizamos funções do tipo $f(x) = x^T H x$, onde H é uma matriz hessiana diagonal com elementos aleatoriamente gerados entre 1 e 1000. O ponto inicial adotado foi o vetor com todas as componentes iguais a 10^6 , com a dimensão correspondente. Com isso foram gerados gráficos comparativos da norma do erro com o número de iterações. A norma do erro é dada pelo próprio x^k , já que neste caso sabemos que a solução é sempre a origem. Como critério de parada impusemos que o processo se repita até que $\|x^k\| \leq 10^{-12}$ ou que o número máximo de iterações 500 seja atingido. Os resultados estão apresentados nos gráficos da figura 1 e na tabela 4, onde dim é a dimensão do problema, A é o maior autovalor de H e a é o menor autovalor de H , exibidos para verificarmos o condicionamento da matriz.

Tabela 4. Resultados dos problemas quadráticos com H diagonal positiva definida com elementos gerados aleatoriamente entre 1 e 1000

Problema			Métodos					
Dim	a	A	MDBLE	MDA	BB1	BB2	CBB	ND
5	194.3338	664.9781	44	66	25	22	12	3
10	8.2362	757.0777	500	500	218	233	86	3
100	4.3308	997.6388	500	500	408	373	186	3
1000	1.6218	999.6068	500	500	500	500	404	3

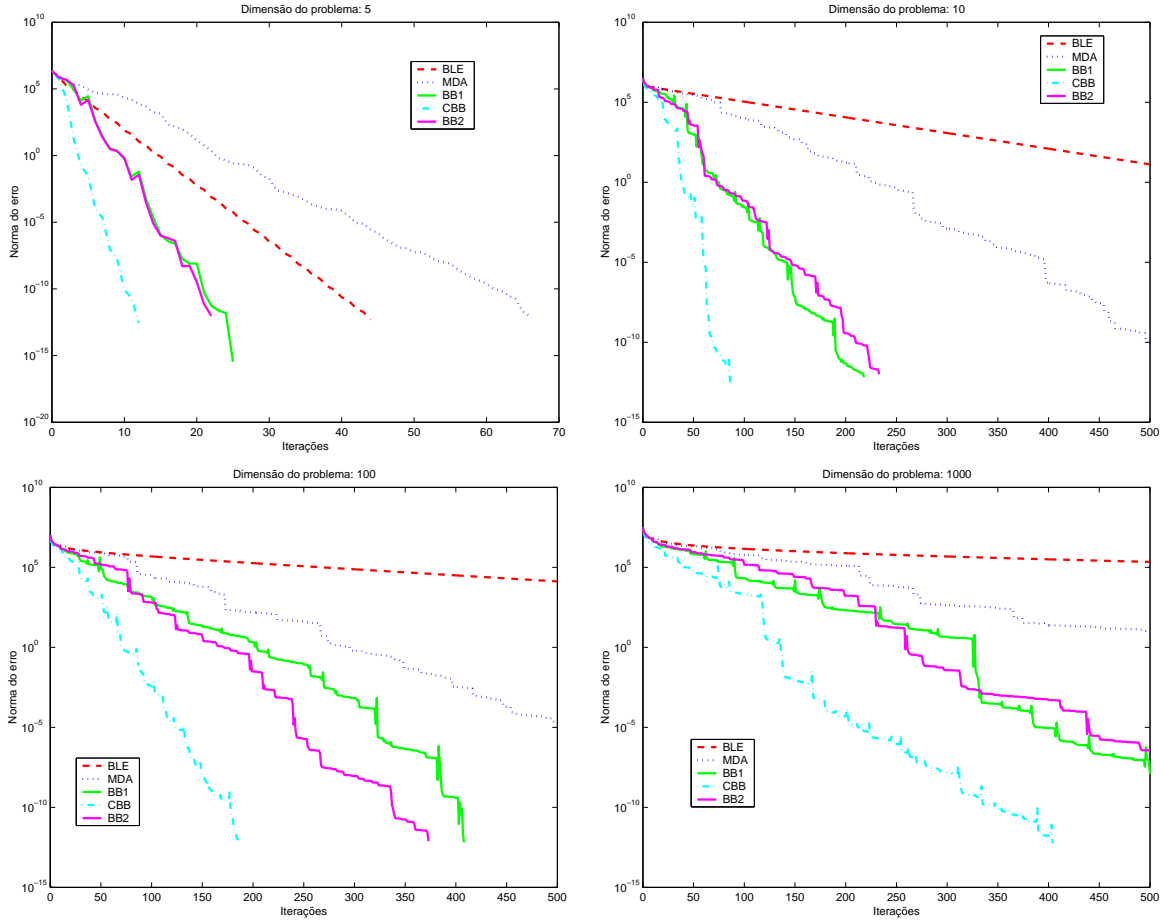


Figura 1 - Gráficos comparativos da norma do erro com o número de iterações para os problemas da tabela 4.

Para os quatro problemas testados o método proposto por Raydan e Svaiter (CBB) obteve melhor desempenho quando comparado aos métodos MDBLE, BB1, BB2 e MDA. A nova direção proposta continua superando os demais métodos para problemas quadráticos de maior dimensão com a matriz hessiana diagonal e positiva definida, não sendo comparada graficamente com os demais métodos por resolver os problemas com apenas 3 iterações. Tal comportamento se justifica pelo fato dos problemas serem diagonais, o que torna o método com a nova direção idêntico ao método de Newton² a partir do segundo ponto, que é obtido do primeiro através de uma iteração do método de máxima descida com busca linear exata.

Para a nova direção temos $M_k s^{k-1} = y^{k-1}$ pela relação (8), sendo que $y^{k-1} = g^k - g^{k-1} = H s^{k-1}$ para problemas quadráticos. Assim, se H é diagonal, temos que a aproximação da matriz Hessiana pela matriz M_k é exata.

A terceira iteração calculada pela nova direção foi necessária para atingir a precisão exigida pelo critério de parada. Como exemplo, para o problema de dimensão 100, tivemos $\|x^1\| = 10^7$, $\|x^2\| = 5.0652 * 10^6$, $\|x^3\| = 4.2070 * 10^{-10}$ e $\|x^4\| = 3.7404 * 10^{-26}$.

²O método de Newton converge em uma iteração para problemas quadráticos estritamente convexos, e neste caso a direção de Newton é $d^k = -H^{-1}g^k$

Pelos gráficos percebemos um comportamento parecido entre BB1 e BB2, superando sempre MDBLE e MDA. Quando comparamos o método de máxima descida com busca linear exata e o método de máxima descida aleatório, percebemos um melhor desempenho de MDA para problemas de maior dimensão. A tabela 1 (problemas de dimensão 2) e o problema de dimensão 5, apresentado na tabela 4 e na figura 1, ilustram que para problemas de dimensão menor o MDBLE pode ter um melhor comportamento do que MDA.

Realizamos ainda testes para problemas quadráticos $\min x^T H x$ com matriz Hessiana densa e positiva definida de dimensões maiores.

Para a construção dos problemas, utilizamos matrizes $H = QDQ^T$, onde $D = \text{diag}(d)$ é a matriz que armazena os autovalores d_i de H e Q é uma matriz ortogonal construída através da transformação de Householder e dada por:

$$Q = I - 2 \frac{uu^T}{u^T u} .$$

As componentes dos vetores d e u foram geradas aleatoriamente nos intervalos $(1, 100)$ e $(-1, 1)$, respectivamente.

Os métodos foram programados em *Matlab* explorando-se a estrutura para os produtos matriz-vetor, sem o armazenamento efetivo da matriz H . Como critério de parada impusemos que o processo se repita até que $\|x^k\| \leq 10^{-7}$ ou que o número máximo de iterações 500 seja atingido. O ponto inicial adotado foi o vetor com todas as componentes iguais a 1.

Além dos métodos utilizados para os testes anteriores, utilizamos a nova direção com uma correção para que seja de descida em todas as iterações, a qual chamaremos de *nova direção de descida* (ND desc). Para esta outra versão da nova direção, adotamos $\alpha_i^k = \left| \frac{y_i^{k-1}}{s_i^{k-1}} \right|$, obtendo sempre $(s^k)^T g^k < 0$, já que

$$(s^k)^T g^k = - \sum_{i=1}^n \frac{(g_i^k)^2}{\alpha_i^k} ,$$

o que caracteriza a direção de descida. Para este conjunto de testes a salvaguarda (11) nunca foi ativada para a nova direção em suas duas versões.

Na tabela 5 apresentamos os resultados, onde *dim* é a dimensão do problema, A e a são o maior e o menor autovalor da matriz H , respectivamente.

Construímos ainda os gráficos comparativos da figura 2 com o número de iterações e a norma do erro, que neste caso é igual a $\|x^k\|$, já que a solução do problema é a origem.

Tabela 5. Resultados dos problemas quadráticos com H positiva definida

Problema			Métodos						
Dim	a	A	MDBLE	MDA	BB1	BB2	CBB	ND	ND desc
2	20.1592	63.2568	14	25	8	6	4	3	3
3	20.1592	75.9266	27	29	16	13	6	77	59
4	8.0685	75.9266	66	51	20	22	14	291	109
5	1.7171	75.9266	194	168	46	41	18	500	500
10	17.1781	92.2973	44	38	18	18	10	49	38
15	3.5285	86.6780	198	102	53	55	29	335	157

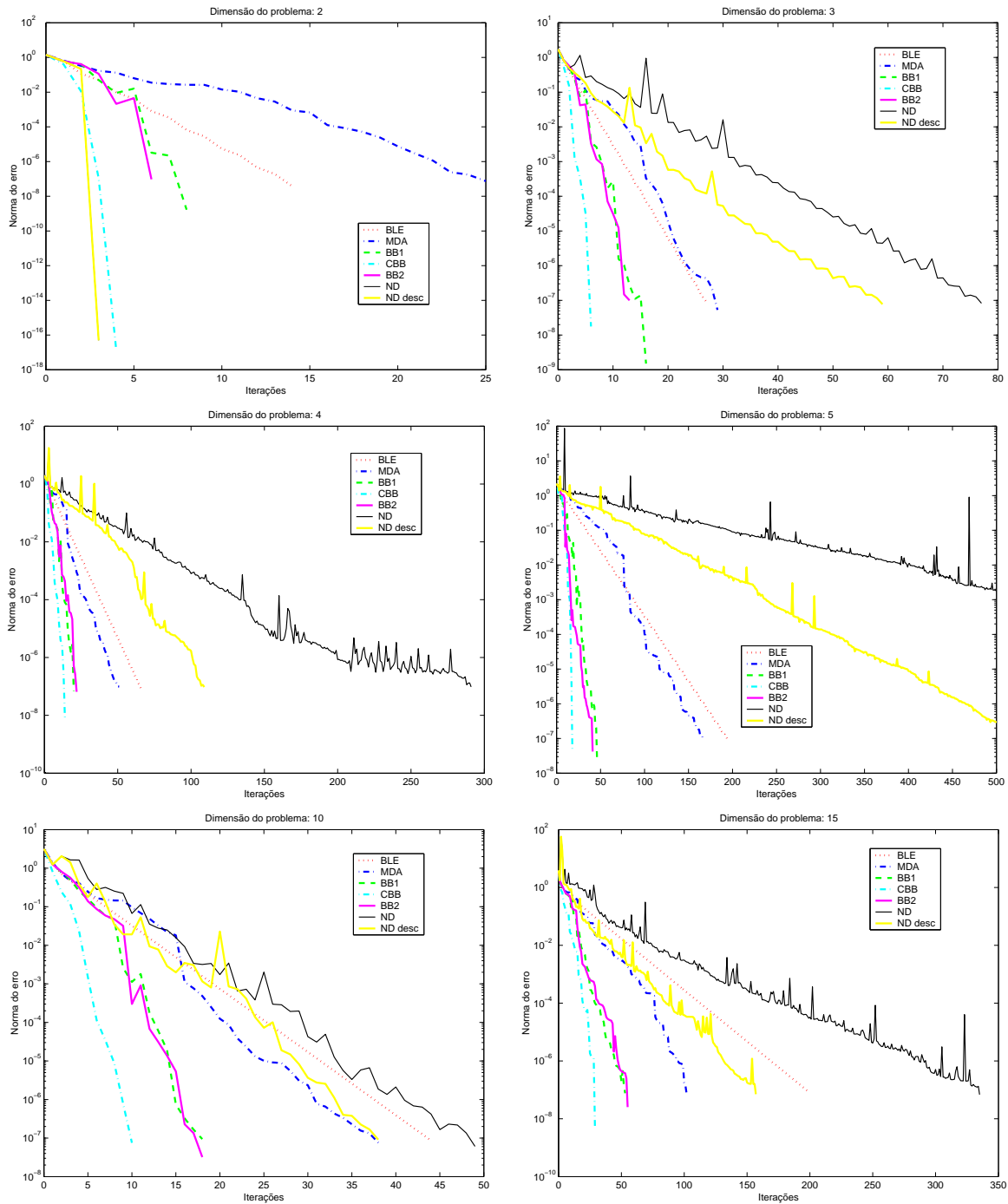


Figura 2 - Gráficos comparativos da norma do erro com o número de iterações para os problemas da tabela 5.

Pelos gráficos notamos ainda um bom comportamento da nova direção para problemas bidimensionais, superando os demais métodos. Porém, com o aumento da dimensão do problema, a nova direção não apresenta um bom desempenho. Para estes problemas CBB apresenta o melhor desempenho, seguido por BB1 e BB2, que competem entre si. Comparando ND e ND desc, percebemos um melhor desempenho de ND desc, superando também MDA para os problemas de dimensão 10 e 15 com 38 e 157 iterações, respec-

tivamente, contra 44 e 198 iterações de MDBLE. Podemos notar também pelos gráficos o comportamento não monótono da nova direção.

3 Problemas de quadrados mínimos não lineares

O problema de quadrados mínimos pode ser visto como um caso especial de problemas de minimização irrestrita, apresentando uma estrutura diferenciada. Escolhemos este tipo de problema para o teste dos métodos estudados devido à sua importância, podendo ser utilizado no contexto de ajuste de curvas para um conjunto de dados ou ainda na resolução de um sistema sobredeterminado, com um maior número de equações do que graus de liberdade.

Um problema de quadrados mínimos consiste em, dada a função $R : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, m \geq n$, resolver

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|R(x)\|^2 . \quad (19)$$

Chamando

$$f(x) = \|R(x)\|^2 = \sum_{i=1}^m (r_i(x))^2 ,$$

onde $r_i(x)$ é a i -ésima componente da função R , podemos reescrever (19) no formato geral dos problemas de minimização irrestrita:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) , \quad \text{com } f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} . \quad (20)$$

No caso em que as funções $r_i(x)$ são lineares, temos um problema de quadrados mínimos lineares e a função objetivo f do problema de minimização irrestrita (20) é quadrática. Para problemas de quadrados mínimos não lineares a função f é não quadrática.

Estudaremos o comportamento de alguns métodos apresentados na seção 2 deste relatório para a resolução do problema de minimização irrestrita associado ao problema de quadrados mínimos.

Para isto precisamos da definição de $g(x)$ e $H(x)$, respectivamente o gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo f calculados em x .

A primeira observação importante é que a função f pode ser expressa da seguinte maneira:

$$f(x) = R(x)^T R(x) . \quad (21)$$

Se $J(x) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é a matriz Jacobiana de R , ou seja, a matriz das derivadas primeiras de R :

$$J_{ij}(x) = \frac{\partial r_i(x)}{\partial x_j} ,$$

então:

$$g(x) = \nabla f(x) = 2J(x)^T R(x) , \quad (22)$$

e a matriz Hessiana é dada por:

$$H(x) = 2 \left(J(x)^T J(x) + \sum_{i=1}^m r_i(x) \nabla^2 r_i(x) \right) . \quad (23)$$

Com isto temos os elementos necessários para os métodos apresentados na próxima seção, com os quais realizamos alguns testes para problemas de quadrados mínimos não lineares.

3.1 Métodos utilizados para os testes computacionais

3.1.1 Método da máxima descida com bissecção

Para o caso quadrático utilizamos o método de máxima descida com passo obtido por busca linear exata. Porém, para o caso de funções não quadráticas, o subproblema de busca linear exata se transforma em um novo problema de minimização, cujo custo dispendido para se obter a solução, na maioria das vezes, não justifica o benefício obtido. Por este motivo optamos por utilizar o método de máxima descida com bissecção. Este método consiste em, a cada iteração, obter o próximo ponto através de:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda g^k, \quad (24)$$

onde $\lambda \in \{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots\}$ é o maior número para o qual se verifica $f(x^k - \lambda g^k) < f(x^k)$. Em outras palavras, inicialmente adotamos $\lambda = 1$ e se $f(x^k - \lambda g^k) \geq f(x^k)$ fazemos $\lambda = \frac{\lambda}{2}$ até que $f(x^k - \lambda g^k) < f(x^k)$.

Uma desvantagem deste método é o número de avaliações extras de função que podemos ter em cada iteração.

3.1.2 Método da máxima descida com os passos propostos por Barzilai e Borwein e algumas modificações

Para problemas de minimização de função objetivo não quadrática também podemos utilizar o método de máxima descida com os passos (4) e (5) propostos por Barzilai e Borwein. Assim teremos em cada iteração:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{1}{\alpha_k} g^k \quad (\text{BB1})$$

e

$$x^{k+1} = x^k - \beta_k g^k. \quad (\text{BB2})$$

Pensando na possibilidade de obter novos passos para serem utilizados com o método de máxima descida, fizemos algumas modificações baseadas na proposta de Barzilai e Borwein.

Como visto anteriormente, os passos propostos por Barzilai e Borwein são obtidos ao se fazer uma aproximação para a matriz Hessiana H_k e para sua inversa H_k^{-1} por matrizes $A_k = \alpha_k I$ e $B_k = \beta_k I$, respectivamente. Em seguida as constantes α_k e β_k são obtidas em cada iteração através das equações:

$$g^k = L(x^k) \quad (25)$$

$$g^{k-1} = L(x^{k-1}), \quad (26)$$

onde $L(x) = g(x^k) + H_k(x - x^k)$ é a aproximação por uma série de Taylor de primeira ordem para o gradiente da função f ao redor de x^k .

Uma nova idéia é, ao invés de utilizarmos a equação (26), utilizarmos a informação de um ponto intermediário x^a entre x^{k-1} e x^k :

$$g(x^a) = L(x^a) , \quad (27)$$

onde $x^a = x^k - cs^{k-1}$, com $c \in (0, 1)$. O objetivo desta escolha é obter uma melhor aproximação para H_k .

Assim de (27) temos:

$$\begin{aligned} g(x^a) &= g^k + H_k(x^a - x^k) \\ &= g^k - cH_k s^{k-1} \\ \Rightarrow H_k s^{k-1} &= \frac{1}{c}(g^k - g(x^a)) . \end{aligned}$$

Chamando $y^a = \frac{1}{c}(g^k - g(x^a))$ e aproximando H_k por $\bar{A}_k = \bar{\alpha}_k I$ e H_k^{-1} por $\bar{B}_k = \bar{\beta}_k I$, temos respectivamente dois novos passos $\frac{1}{\bar{\alpha}_k}$ e $\bar{\beta}_k$ com

$$\bar{\alpha}_k = \frac{(s^{k-1})^T y^a}{(s^{k-1})^T s^{k-1}} \quad (28)$$

$$\bar{\beta}_k = \frac{(s^{k-1})^T y^a}{(y^a)^T y^a} . \quad (29)$$

Notamos que, para o caso quadrático,

$$y^a = \frac{1}{c}(Hx^k + b - Hx^a - b) = \frac{1}{c}H(x^k - x^a + cs^{k-1}) = Hs^{k-1} = y^{k-1} ,$$

ou seja, os novos passos propostos são idênticos aos passos originais propostos por Barzilai e Borwein.

Uma desvantagem destas novas propostas é a avaliação extra do gradiente no ponto x^a em cada iteração.

Para a implementação em *Matlab* destas duas novas propostas para os testes realizados na seção 3.2 adotamos $c = 0.1$.

3.1.3 Nova direção proposta e algumas modificações

Como no caso dos passos propostos por Barzilai e Borwein, a nova direção proposta na seção 2.3 também pode ser utilizada para problemas não lineares mais gerais.

Para a nova direção, a cada iteração temos

$$x^{k+1} = x^k + d^k ,$$

onde $d^k = s^k = -M_k^{-1}g^k$, com $M_k = \text{diag}(\alpha^k)$ uma matriz diagonal que aproxima a matriz Hessiana H_k e cujas componentes são dadas por $\alpha_i^k = y_i^{k-1}/s_i^{k-1}$.

Para esta direção estar bem definida, devemos colocar algumas salvaguardas no algoritmo.

A primeira salvaguarda é ativada se a relação $|y_i^{k-1}| > \varepsilon$, com $\varepsilon > 0$, não for satisfeita, já que se $|y_i^{k-1}|$ for muito pequeno, teremos a componente d_i^k da direção muito grande quando comparada às outras. No algoritmo implementado utilizamos $y_i^{k-1} = 1$ quando $|y_i^{k-1}| < \varepsilon$, onde ε é a mesma constante utilizada para o critério de parada $\|g(x^k)\| < \varepsilon$. A segunda salvaguarda é ativada quando temos $|s_i^{k-1}| < \varepsilon$. Se $s_i^{k-1} = 0$, teremos $d_i^k = 0$ e, conseqüentemente, $s_i^k = 0$. Assim não conseguiremos alterar o valor da i -ésima componente da seqüência de pontos $\{x^k\}$. Quando isso ocorre e $x_i^k \neq x_i^*$, com x^* um ponto estacionário, o método não convergirá para a solução. Se $|s_i^{k-1}| < \varepsilon$, para evitar passos pequenos longe da solução, adotamos no algoritmo $s_i^{k-1} = \|s^{k-1}\|$. Esta é a primeira versão da nova direção que será testada para problemas de quadrados mínimos não lineares.

Ampliando nosso estudo, percebemos que esta direção ainda não está definida como uma direção de descida. Para que isto ocorra, lembramos que d^k deve ser tal que $(d^k)^T g^k < 0$. Assim para d^k ser caracterizada como uma direção de descida devemos ter:

$$-(g^k)^T M_k^{-1} g^k < 0 .$$

Uma condição suficiente para assegurar este resultado é impor que M_k seja uma matriz positiva definida. Como M_k é diagonal, então devemos ter $\alpha_i^k > 0$. Impomos esta condição substituindo os elementos da matriz M_k por seus respectivos valores absolutos, de onde obtemos:

$$d_i^k = - \left| \frac{s_i^{k-1}}{y_i^{k-1}} \right| g_i^k .$$

Com as mesmas salvaguardas feitas anteriormente, implementamos em *Matlab* esta segunda versão para a nova direção, a qual chamaremos de *nova direção de descida* (ND desc).

Com estas modificações temos bem definida a direção d^k . Porém, com o objetivo de melhorar a convergência do método para funções não quadráticas, utilizamos também um modelo de algoritmo com testes para a norma de d^k e para a condição do ângulo entre d^k e $-g^k$ (ver, p. ex. [5] e [8]), além de utilizarmos um modelo de busca não monótona para o passo, baseado no estudo feito por Grippo, Lampariello e Lucidi em [6]. Esses ingredientes completam a *nova direção com busca não monótona* (ND BNM).

Com a direção de descida d^k bem definida, o próximo passo será analisar a norma do vetor d^k .

Para evitar passos muito pequenos quando x^k está longe da solução, podemos vincular $\|d^k\|$ com a norma de g^k . Assim verificamos se

$$\|d^k\| \geq \gamma_1 \|g^k\| , \tag{30}$$

com $\gamma_1 \in \mathbb{R}$, $\gamma_1 > 0$. Caso $\|d^k\| < \gamma_1 \|g^k\|$, tomamos d^k como um vetor de norma igual a $\gamma_1 \|g^k\|$, fazendo no algoritmo:

$$d^k \leftarrow \gamma_1 \frac{\|g^k\|}{\|d^k\|} d^k .$$

Também devemos evitar passos muito grandes, verificando se

$$\|d^k\| \leq \gamma_2 \|g^k\| , \quad (31)$$

com $\gamma_2 \in \mathbb{R}$, $\gamma_2 > 0$. Caso $\|d^k\| > \gamma_2 \|g^k\|$, fazemos no algoritmo:

$$d^k \leftarrow \gamma_2 \frac{\|g^k\|}{\|d^k\|} d^k .$$

Um outro problema ocorre quando o ângulo θ entre d^k e $-g^k$ é próximo de $\frac{\pi}{2}$. No caso em que d^k é quase ortogonal a $-g^k$, podemos ter pouco decréscimo da função objetivo. Para evitar este tipo de problema, aceitamos a direção se o cosseno do ângulo θ for maior que uma certa tolerância $\xi \in \mathbb{R}$, que corresponde ao cosseno de um ângulo limite escolhido menor que $\frac{\pi}{2}$. Estamos interessados em ângulos θ menores que este ângulo limite. Assim queremos que

$$\cos \theta = \frac{-(g^k)^T d^k}{\|g^k\| \|d^k\|} \geq \xi \Rightarrow (g^k)^T d^k \leq -\xi \|g^k\| \|d^k\| . \quad (32)$$

Caso isso não ocorra adotamos $d^k = -g^k$.

Após escolhida a direção d^k , podemos definir

$$x^{k+1} = x^k + t d^k ,$$

onde $t > 0$ é o passo a partir de x^k na direção d^k .

Estamos interessados em obter pontos x^{k+1} tais que $f(x^{k+1}) < f(x^k)$. Entretanto, podemos ser mais exigentes e pedir um decréscimo suficiente no valor da função objetivo através da *condição de Armijo*:

$$f(x^k + t d^k) < f(x^k) + \beta t (d^k)^T g^k , \quad (33)$$

com $\beta \in (0, 1)$, (ver, por exemplo Friedlander [5]).

Baseado na condição de Armijo, foi proposto um modelo de algoritmo com busca linear não monótona em [6], o qual se mostrou eficiente para o problema de minimização irrestrita utilizando-se o método de Newton.

Com base neste modelo, ao invés de utilizar a condição de Armijo (33) para a determinação do passo t , utilizamos uma busca não monótona exigindo que:

$$f(x^k + t d^k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} [f(x^{k-j})] + \beta t (d^k)^T g^k , \quad (34)$$

onde $m(k) = \min[k, M]$, com M inteiro e positivo.

Este modelo permite uma certa liberdade para o método, podendo ocorrer o acréscimo no valor da função objetivo em alguma iteração, mas assegurando um decréscimo suficiente para f com relação ao máximo valor funcional ao longo de um número prefixado

de iterações prévias. A figura 3 ilustra graficamente a liberdade inerente a esta busca, associada à escolha para o inteiro positivo M que define $m(k)$. Tal escolha implicará em uma possível translação da fronteira da região estabelecida pela condição de Armijo (33). Como consequência, o intervalo admissível para o tamanho do passo $[0, \hat{t}]$, será, em geral, expandido para $[0, \tilde{t}]$ pela condição mais tolerante (34).

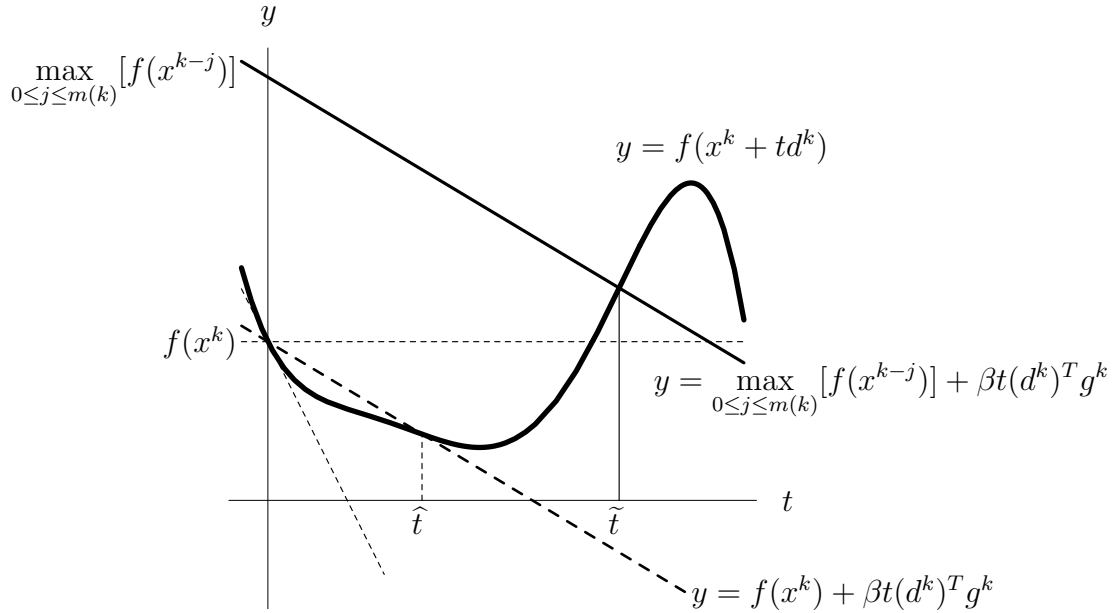


Figura 3 - Ilustração para a busca não monótona.

Utilizamos o algoritmo com busca não monótona pelos bons desempenhos apresentados por Grippo, Lampariello e Lucidi em [6], na associação com o método de Newton, com os passos propostos por Barzilai e Borwein em Raydan [12] e com a nova proposta de passo por Dai, Yuan e Yuan [2], que apresentaremos na próxima seção. Com isso desejamos obter um algoritmo com convergência global para a nova direção.

Grippo, Lampariello e Lucidi apresentam um resultado de convergência global para um modelo algorítmico com as modificações realizadas. A seguir apresentamos o teorema cuja demonstração pode ser encontrada em [6].

Teorema de convergência global para o algoritmo com busca não monótona:

Seja $\{x^k\}$ uma sequência definida por

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k, \text{ com } d^k \neq 0.$$

Vamos supor que as seguintes hipóteses se verificam:

1. $\Omega_0 = \{x : f(x) \leq f(x^0)\}$ é um conjunto compacto.
2. Existem c_1 e c_2 números positivos tais que

$$(g^k)^T d^k \leq -c_1 \|g^k\|^2 \text{ e} \tag{35}$$

$$\|d^k\| \leq c_2 \|g^k\|. \tag{36}$$

3. $t_k = \sigma^{h_k} a$, onde $\sigma \in (0, 1)$, $a > 0$ e h_k é o primeiro inteiro não negativo h para o qual

$$f(x^k + \sigma^{h_k} a d^k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} [f(x^{k-j})] + \beta \sigma^{h_k} a (g^k)^T d^k ,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min[m(k-1) + 1, M]$, $k \geq 1$, com $\beta \in (0, 1)$ e M inteiro não negativo.

Então temos que:

- a sequência $\{x^k\}$ permanece em Ω_0 e todo ponto limite \bar{x} satisfaz $g(\bar{x}) = 0$;
- um ponto limite de $\{x^k\}$ não é máximo local de f ;
- se o número de pontos estacionários de f é finito em Ω_0 , então a sequência $\{x^k\}$ converge.

Notamos que a relação (31) do algoritmo para a nova direção com busca não monótona é equivalente à hipótese (36) do teorema, com $c_2 = \gamma_2$. Também da relação (30) temos $-\|d^k\| \leq -\gamma_1 \|g^k\|$, que junto com a relação (32) resulta na condição (35) do teorema:

$$(g^k)^T d^k \leq -\xi \gamma_1 \|g^k\|^2 ,$$

com $c_1 = \xi \gamma_1$.

A hipótese 3 do teorema é satisfeita por (34), com $a = 1$, $\sigma = 0.5$ e $m(k) = \min[k, M]$. Logo, com o resultado de Grippo, Lampariello e Lucidi, temos a garantia de convergência global com a nova direção fazendo-se uma busca não monótona, para funções que satisfaçam à hipótese 1 do teorema. Porém, nada podemos assegurar sobre a velocidade de convergência do método.

Para os testes computacionais adotamos $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 10^5$, $\xi = 0.1$, $\beta = 0.1$ e $M = 10$.

3.1.4 A proposta de Dai, Yuan e Yuan e outras interpretações para as novas propostas de passo e direção

Em [2], Dai, Yuan e Yuan interpretaram a escolha do primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein através do conceito de interpolação e propuseram um novo passo para ser utilizado com a direção de máxima descida. O nosso objetivo é estabelecer uma conexão com o estudo apresentado em [2], dando uma interpretação via interpolação, para as novas propostas de passos e de direção.

A idéia de Dai, Yuan e Yuan é, inicialmente, aproximar a função objetivo f por uma quadrática (Taylor de segunda ordem) em torno de x^k :

$$f(x) \simeq f(x^k) + (g^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T H_k (x - x^k) .$$

Fazendo esta aproximação para f em pontos da forma $x^k + \theta s^{k-1}$, com $\theta \in \mathbb{R}$, ou seja, pontos que pertencem à reta que passa por x^k e x^{k-1} , temos:

$$f(x^k + \theta s^{k-1}) \simeq f(x^k) + \theta (g^k)^T s^{k-1} + \frac{\theta^2}{2} (s^{k-1})^T H_k s^{k-1} = q(\theta) .$$

Para interpolar a função f por esta quadrática, devemos impor três condições. Estas condições são estabelecidas fazendo

$$f(x^k + \theta s^{k-1}) = q(\theta) \quad \text{ou} \quad \frac{df(x^k + \theta s^{k-1})}{d\theta} = \frac{dq(\theta)}{d\theta}$$

para algum valor de θ , o que equivale a:

$$f(x^k + \theta s^{k-1}) = f(x^k) + \theta (g^k)^T s^{k-1} + \frac{\theta^2}{2} (s^{k-1})^T H_k s^{k-1} \quad (37)$$

$$g(x^k + \theta s^{k-1})^T s^{k-1} = (g^k)^T s^{k-1} + \theta (s^{k-1})^T H_k s^{k-1} . \quad (38)$$

Antes de escolher θ para impor as condições (37) e (38) fazemos a aproximação $H_k \simeq tI$ para deduzir o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein e um dos novos passos propostos na seção 3.1.2.

A escolha de θ se limitará ao intervalo $[-1, 0]$ para utilizarmos informações dos pontos x^k , x^{k-1} e $x^a = x^k - c s^{k-1}$, com $c \in (0, 1)$. Assim teremos três escolhas possíveis para θ em (37) e (38): $\theta = 0$, $\theta = -1$ e $\theta = -c$, que resultam nas expressões abaixo.

Para $\theta = 0$:

$$f(x^k) = f(x^k) \quad (39)$$

$$(g^k)^T s^{k-1} = (g^k)^T s^{k-1} . \quad (40)$$

Para $\theta = -1$:

$$f(x^{k-1}) = f(x^k) - (g^k)^T s^{k-1} + \frac{t}{2} (s^{k-1})^T s^{k-1} \quad (41)$$

$$(g^{k-1})^T s^{k-1} = (g^k)^T s^{k-1} - t (s^{k-1})^T s^{k-1} . \quad (42)$$

Para $\theta = -c$:

$$f(x^a) = f(x^k) - c (g^k)^T s^{k-1} + \frac{c^2 t}{2} (s^{k-1})^T s^{k-1} \quad (43)$$

$$g(x^a)^T s^{k-1} = (g^k)^T s^{k-1} - ct (s^{k-1})^T s^{k-1} . \quad (44)$$

Como as condições (39) e (40) são sempre satisfeitas, o que caracterizará cada método será a escolha da terceira condição.

Impondo (42) obtemos o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein:

$$\frac{1}{t} = \frac{1}{\alpha_k} = \frac{(s^{k-1})^T s^{k-1}}{(y^{k-1})^T s^{k-1}} ,$$

conforme estabelecido em (4).

Utilizando a condição (44) obtemos um dos novos passos que apresentamos anteriormente:

$$\frac{1}{t} = \frac{(s^{k-1})^T s^{k-1}}{(y^a)^T s^{k-1}} ,$$

onde $y^a = \frac{1}{c}(g^k - g(x^a))$.

Da condição (41) temos o novo passo proposto em [2]:

$$\frac{1}{t} = \frac{(s^{k-1})^T s^{k-1}}{2(f(x^{k-1}) - f(x^k) + (g^k)^T s^{k-1})} .$$

E, finalmente, com a condição (43) obtivemos uma nova proposta utilizando informações de um ponto intermediário x^a :

$$\frac{1}{t} = \frac{c^2 (s^{k-1})^T s^{k-1}}{2(f(x^a) - f(x^k) + c(g^k)^T s^{k-1})} .$$

A desvantagem desta escolha é a avaliação extra da função no ponto x^a em cada iteração. Porém este cálculo tem, em geral, um custo menor do que o cálculo de $g(x^a)$ em cada iteração, que era necessário para o novo passo proposto na seção 3.1.2.

Para a implementação computacional, adotamos $c = 0.1$.

Para a interpretação, via interpolação, da nova direção proposta, aproximamos a matriz Hessiana por $M_k = \text{diag}(\alpha^k)$ e utilizamos a condição (38) com $\theta = -1$:

$$(g^{k-1})^T s^{k-1} = (g^k)^T s^{k-1} - (s^{k-1})^T M_k s^{k-1} .$$

Assim temos:

$$(M_k s^{k-1} - y^{k-1})^T s^{k-1} = 0 . \quad (45)$$

Para a dedução da nova direção impomos $M_k s^{k-1} - y^{k-1} = 0$, o que resulta em

$$\alpha_i^k = \frac{y_i^{k-1}}{s_i^{k-1}} . \quad (46)$$

Através desta nova interpretação, percebemos que (46) não é a única solução de (45). Chamando $u^k = M_k s^{k-1} - y^{k-1}$, para satisfazer (45) devemos ter:

$$\sum_{i=1}^n u_i^k s_i^{k-1} = 0 . \quad (47)$$

Para obter uma outra escolha para M_k , tomamos sucessivamente, e sem repetição, dois números inteiros aleatórios (i e j) entre 1 e n e impomos $u_i^k s_i^{k-1} = -u_j^k s_j^{k-1}$ para que a relação (47) seja satisfeita, com a anulação dos termos do somatório dois a dois.

Para isso, construímos inicialmente um vetor v com componentes iguais aos números inteiros de 1 a n permutados aleatoriamente. Esta permutação nos fornecerá a ordem dos termos da soma em (47) que se anularão.

A partir daí adotamos

$$u_i^k s_i^{k-1} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = v(1), \dots, v(\ell) \\ -1, & \text{se } i = v(\ell + 1), \dots, v(2\ell), \end{cases}$$

com $2\ell = n$ se n é par ou $2\ell + 1 = n$ se n é ímpar.

No caso de n ímpar adotamos $u_n^k = 0$.

Como $u_i^k = \alpha_i^k s_i^{k-1} - y_i^{k-1}$, temos:

$$\alpha_i^k = \begin{cases} \frac{y_i^{k-1} s_i^{k-1} + 1}{(s_i^{k-1})^2}, & \text{se } i = v(1), \dots, v(\ell), \\ \frac{y_i^{k-1} s_i^{k-1} - 1}{(s_i^{k-1})^2}, & \text{se } i = v(\ell + 1), \dots, v(2\ell) \\ \frac{y_i^{k-1}}{s_i^{k-1}}, & \text{se } i = v(n) = v(2\ell + 1) \text{ e } n \text{ é ímpar} \end{cases}$$

Assim temos a dedução de uma outra proposta de direção, a *nova direção modificada* (ND mod):

$$d_i^k = -\frac{1}{\alpha_i^k} g_i^k ,$$

de onde obtemos o próximo ponto $x^{k+1} = x^k + d^k$.

Para a implementação computacional, como salvaguardas impomos $\alpha_i^k = 1$ quando $s_i^{k-1} = 0$ ou $y_i^{k-1} s_i^{k-1} + 1 = 0$ para $i = v(1), \dots, v(\ell)$, $y_i^{k-1} s_i^{k-1} - 1 = 0$ para $i = v(\ell + 1), \dots, v(2\ell)$ e $y_{v(n)}^{k-1} = 0$ para n ímpar.

3.1.5 Método de Gauss-Newton

Para os problemas de quadrados mínimos não lineares, ao invés de utilizar o método de Newton que envolve o cálculo da matriz Hessiana da função objetivo, usamos o método de Gauss-Newton.

Para o método de Newton, teríamos em cada iteração:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k H_k^{-1} g^k ,$$

onde H_k^{-1} é a inversa da matriz Hessiana avaliada em x^k .

No caso de problemas de quadrados mínimos, H_k é dada por (23):

$$H_k = 2 \left(J(x^k)^T J(x^k) + \sum_{i=1}^m r_i(x^k) \nabla^2 r_i(x^k) \right) .$$

Quando o resíduo na solução é zero, ou seja, $r_i(x^*) = 0$, então $H^* = 2J^{*T}J^*$ e neste caso podemos assumir que perto da solução teremos

$$\sum_{i=1}^m (r_i(x) \nabla^2 r_i(x)) \simeq 0 .$$

Com esta aproximação em mente, o método de Gauss-Newton consiste em a cada iteração tomarmos

$$H_k = 2J(x^k)^T J(x^k) . \quad (48)$$

Assim, a partir de um ponto x^k , o próximo ponto no método de Gauss-Newton será dado por:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k (2J(x^k)^T J(x^k))^{-1} g^k . \quad (49)$$

Outra interpretação para o método de Gauss-Newton pode ser obtida aproximando, a cada iteração, a função $R(x)$ em torno de x^k por um modelo linear:

$$R(x) \simeq R(x^k) + J(x^k)(x - x^k) = L(x) .$$

Assim o problema de quadrados mínimos não lineares $\min R(x)^T R(x)$ se reduz a um problema de quadrados mínimos lineares a cada iteração:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x)^T L(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|J(x^k)x + R(x^k) - J(x^k)x^k\|^2 . \quad (50)$$

A solução de (50) será o ponto x^{k+1} obtido em cada iteração e tal que o vetor $J(x^k)x^{k+1} + R(x^k) - J(x^k)x^k$ seja ortogonal à imagem de $J(x^k)$, o que implica em $(J(x^k)x^{k+1} + R(x^k) - J(x^k)x^k)$ pertencer ao núcleo de $J(x^k)^T$, ou seja, x^{k+1} deve ser tal que

$$J(x^k)^T (J(x^k)x^{k+1} + R(x^k) - J(x^k)x^k) = 0 .$$

Notamos que desta última expressão, usando (22), recaímos em (49) com $\lambda_k = 1$.

Também fizemos a implementação do método de Gauss-Newton com bissecção, que consiste em inicialmente adotar $\lambda = 1$ e se não houver decréscimo na função objetivo fazer $\lambda = \frac{\lambda}{2}$ até que $f(x^{k+1}) < f(x^k)$.

A vantagem do método de Gauss-Newton é a não utilização das segundas derivadas da função $R(x)$, o que poderia ser computacionalmente caro.

Por outro lado, este método aproxima a matriz Hessiana considerando que o resíduo na solução é nulo ou próximo de zero. Se este resíduo for grande na solução, o método de Gauss-Newton pode não apresentar bons resultados. Além disso, para problemas fortemente não lineares, o método de Gauss-Newton também não apresenta, em geral, um bom desempenho.

3.2 Testes realizados

Para comparar os métodos apresentados anteriormente para problemas de quadrados mínimos não lineares, utilizamos algumas funções teste apresentadas por Moré, Garbow e Hillstrom em [10]. A análise comparativa será feita através de gráficos de *performance profile*, seguindo a técnica apresentada por Dolan e Moré em [4]. Além dos métodos estudados, apresentaremos os resultados da submissão eletrônica de alguns problemas ao NEOS-server³, optando pelo método de Newton com regiões de confiança para resolvê-los.

Para os problemas de quadrados mínimos não lineares

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x)^T F(x)$$

utilizamos as seguintes funções $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ extraídas de Moré, Garbow e Hillstrom [10] com os seus respectivos pontos iniciais x_0 :

³<http://www-neos.mcs.anl.gov>

1. *Linear function - full rank*
 $n = 10, m = 20$ e $x_0 = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{10}$
2. *Linear function - rank 1*
 $n = 10, m = 20$ e $x_0 = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{10}$
3. *Linear function - rank 1 with zero columns and rows*
 $n = 10, m = 20$ e $x_0 = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{10}$
4. *Rosenbrock function*
 $n = 2, m = 2$ e $x_0 = (-1.2, 1)^T$
5. *Helical valley function*
 $n = 3, m = 3$ e $x_0 = (-1, 0, 0)^T$
6. *Powell singular function*
 $n = 4, m = 4$ e $x_0 = (3, -1, 0, 1)^T$
7. *Freudenstein and Roth function*
 $n = 2, m = 2$ e $x_0 = (0.5, -2)^T$
8. *Bard function*
 $n = 3, m = 15$ e $x_0 = (1, 1, 1)^T$
9. *Kowalik and Osborne function*
 $n = 4, m = 11$ e $x_0 = (0.25, 0.39, 0.415, 0.39)^T$
10. *Meyer function*
 $n = 3, m = 16$ e $x_0 = (0.02, 4000, 250)^T$
11. *Watson function*
 $n = 9, m = 31$ e $x_0 = (0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^9$
12. *Box three-dimensional function*
 $n = 3, m = 3$ e $x_0 = (0, 10, 20)^T$
13. *Jennrich function*
 $n = 2, m = 10$ e $x_0 = (0.3, 0.4)^T$
14. *Brown and Dennis function*
 $n = 4, m = 20$ e $x_0 = (25, 5, -5, -1)^T$
15. *Chebyquad function*
 $n = 9, m = 9$ e $x_0 = (\xi_j)$, onde $\xi_j = j/10, j = 1, \dots, 9$
16. *Brown almost-linear function*
 $n = 10, m = 10$ e $x_0 = (\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})^T \in \mathbb{R}^{10}$
17. *Osborne 1 function*
 $n = 5, m = 33$ e $x_0 = (0.5, 1.5, -1, 0.01, 0.02)^T$

18. *Osborne 2 function*

$$n = 11, m = 65 \text{ e } x_0 = (1.3, 0.65, 0.65, 0.7, 0.6, 3, 5, 7, 2, 4.5, 5.5)^T$$

19. *Powell badly scaled function*

$$n = 2, m = 2 \text{ e } x_0 = (0, 1)^T$$

O primeiro conjunto apresentado corresponde aos testes em *Matlab*. Em seguida, apresentamos o resultado de algumas funções implementadas em *Fortran* para a submissão eletrônica ao NEOS-server.

Testes em *Matlab*

Para os algoritmos utilizados nos testes em *Matlab* adotamos como critérios de parada $\|g(x^k)\| \leq 10^{-8}$, $\|x^k - x^{k-1}\| \leq 10^{-16}$ e o número máximo de iterações $k = 1000$. Quando $\|g(x^k)\| \leq 10^{-8}$ temos a convergência do método. Para $\|x^k - x^{k-1}\| \leq 10^{-16}$ temos uma estagnação do método, que consideraremos como um fracasso. O mesmo será considerado quando $k = 1000$, na maioria dos casos, com a não convergência do método. Porém, para as funções testadas conhecemos um ponto de mínimo apresentado em [10], o que nos permite verificar se o método obteve uma aproximação para esta solução.

Nos algoritmos utilizamos a função *expmod(x)* ao invés da função exponencial usual (*exp(x)*). Esta função foi construída com o objetivo de evitar *overflow*, sendo idêntica à função exponencial até um determinado ponto (o qual adotamos como $x = 300$), mas sendo aproximada a partir deste valor por uma reta cujo coeficiente angular é igual à derivada de *exp(x)* avaliada em $x = 300$.

Construímos também duas funções utilizadas nos algoritmos. A primeira (*funcao(F, x)*) retorna o valor da função $f(x) = F(x)^T F(x)$. A segunda (*gradiente(F, x)*) retorna o valor do gradiente g da função f avaliada em x da seguinte maneira: $g(x) = 2J(x)^T F(x)$, onde $J(x)$ é a matriz jacobiana da função $F(x)$, que, para as funções testadas, foi obtida analiticamente ou por diferenças finitas.

Para os métodos que necessitam de dois pontos para sua inicialização, obtemos o segundo ponto através de uma iteração do método de máxima descida com passo puro ($\lambda = 1$) a partir do primeiro ponto.

Inicialmente trabalhamos com as 19 funções apresentadas para os testes de problemas de quadrados mínimos.

Nas tabelas 6 e 7 apresentamos o número de iterações que cada método obteve para resolver cada problema. Ao lado do número de iterações aparecem as letras C , C^* , N e P , que indicam, respectivamente, a convergência do método para o valor da função esperado segundo Moré, Garbow e Hillstrom, a convergência do método para um ponto diferente do que aparece em [10], a não convergência do método, e uma futura penalização para *performance profile*, pelo número máximo de iterações (1000) ter sido atingido mas o ponto estar próximo a um ponto estacionário com $10^{-8} < \|g(x_{1000})\| < 10^{-6}$.

Os métodos apresentados na tabela 6 são: o método de máxima descida com bissecção (MMD bis), com os passos propostos por Barzilai e Borwein (BB1 e BB2) e os métodos de Gauss-Newton com passo puro (GN) e com bissecção (GN bis). Na tabela 7 estão

os resultados para as novas propostas de direção e tamanho de passo: nova direção original (ND), nova direção com salvaguarda para caracterizar a direção de descida (ND desc.), nova direção com busca linear não monótona (ND BNM), nova direção apresentada em 3.1.4 (ND mod), as modificações para os passos propostos por Barzilai e Borwein (BB1 mod e BB2 mod) apresentadas na seção 3.1.2 e a modificação para a proposta de passo de Dai, Yuan e Yuan (DYY mod) apresentada na seção 3.1.4.

Tabela 6. Número de iterações para a resolução dos problemas propostos pelos métodos estudados.

Problema	MMD bis		BB1		BB2		GN		GN bis	
1	2	C	2	C	2	C	1	C	1	C
2	19	N	3	C	3	C	1	C	1	C
3	19	N	3	C	3	C	1000	N	1000	N
4	1000	N	1000	N	132	C	2	C	10	C
5	1000	N	225	C	107	C	10	C	9	C
6	1000	N	195	C	213	C	12	C	12	C
7	1000	N	87	C	55	C	43	C	47	N
8	1000	N	63	C	392	C	5	C	5	C
9	1000	N	93	C*	1000	N	65	C	28	C
10	1000	N	82	C*	1000	N	83	C	14	C
11	1000	N	1000	N	1000	N	5	C	5	C
12	1000	N	50	C	19	C	4	C	4	C
13	1	C*	1	C*	1	C*	30	N	11	N
14	629	N	165	C	152	C	1000	N	743	N
15	1000	P	805	C	1000	N	6	N	93	C
16	19	N	86	N	3	N	1	N	1	N
17	1000	N	3	N	2	N	6	C	7	C
18	1000	N	68	C*	1000	N	6	N	13	C
19	1000	N	2	N	5	C*	13	C	54	C

Tabela 7. Número de iterações para a resolução dos problemas pelos novos métodos propostos.

Problema	BB1 mod		DYY mod		BB2 mod		ND		ND desc		ND BNM		ND mod	
1	2	C	2	C	2	C	2	C	2	C	2	C	6	N
2	3	C	3	C	3	C	3	C	3	C	1000	N	3	C
3	3	C	23	N	3	C	3	C	3	C	1000	N	3	C
4	1000	N	94	N	90	C	1000	N	1000	N	1000	N	27	N
5	171	C	99	C	87	C	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N
6	222	C	271	C	205	C	1000	N	1000	N	1000	N	29	C
7	383	C	118	C	73	C	444	N	288	N	1000	N	12	N
8	48	C	78	N	200	C	32	N	37	N	1000	N	81	C
9	129	C*	325	C*	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N
10	9	C*	9	C*	78	C*	9	C*	4	N	3	C*	8	C*
11	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N	15	N
12	11	C	11	C	27	C	1000	N	1000	N	1000	P	1000	N
13	1	C*	1	C*	1	C*	1	C*	1	C*	1	C*	1	C*
14	155	C	149	N	123	C	1000	N	1000	N	1000	N	5	N
15	152	C	703	C	1000	N	1000	N	1000	P	1000	P	25	N
16	1000	N	110	N	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N	1000	N
17	9	C*	9	C*	2	N	33	C*	31	C*	2	N	136	N
18	228	C*	67	N	1000	N	53	C*	30	N	1000	N	525	C*
19	2	N	2	N	5	C*	1000	N	285	N	1000	N	15	N

Para compararmos os resultados, utilizamos gráficos de *performance profile*, cujo estudo foi baseado em Dolan e Moré [4] e cujas características resumimos a seguir.

Com n_p problemas e n_s métodos para a resolução destes problemas, construímos uma matriz M com dimensão $n_s \times n_p$ tal que seus elementos $(m_{s,p})$ contém o número de iterações que o método s obteve para resolver o problema p . Quando não há convergência para o método s ao resolver o problema p , fixamos $m_{s,p} = 10^5$. Porém, no caso em que obtivemos, com o número máximo de iterações, uma solução próxima da esperada (indicado por P nas tabelas 6 e 7), impomos uma penalização diferente, fazendo $m_{s,p} = 1500$. Estas duas penalizações são impostas para diferenciarmos os casos em que realmente temos uma convergência para a solução e distinguirmos a efetiva não convergência de uma ‘quase convergência’.

Construída a matriz M , podemos comparar o desempenho do método s para resolver o problema p com o melhor desempenho entre todos os métodos para resolver este problema. Assim, a partir da matriz M , construímos uma matriz $R : n_s \times n_p$, onde cada elemento $r_{s,p}$ representa a taxa entre o número de iterações realizadas pelo método s para resolver o problema p e o número mínimo de iterações necessário para resolver este problema:

$$r_{s,p} = \frac{m_{s,p}}{\bar{m}_p} ,$$

onde $\bar{m}_p = \min_s \{m_{s,p}\}$.

Notamos que $r_{s,p} \geq 1$ e $r_{s,p} = 1$ quando o método s obteve o menor número de iterações para resolver o problema p , ou seja, obteve o melhor desempenho para este problema.

A última etapa é a construção da função de distribuição $\rho_s(t)$ para cada método s , a qual será utilizada para os gráficos comparativos e é definida por:

$$\rho_s(t) = \frac{1}{n_p} \text{card}\{r_{s,p} \leq t\} ,$$

onde t deve ser maior ou igual a 1, já que $r_{s,p} \geq 1$.

Para a análise gráfica destacam-se dois valores: $\rho_s(1)$ e $\rho_s(t_{max})$ tal que t_{max} é o maior valor de t para a construção dos gráficos de t por $\rho_s(t)$.

O valor $\rho_s(1)$ representa a porcentagem de problemas para os quais o método s obteve o menor número de iterações na resolução. Já $\rho_s(t_{max})$ equivale à porcentagem de problemas resolvidos pelo método s até t_{max} . Se $\rho_s(\bar{t}) = 1$ temos a resolução de todos os problemas pelo método s em $t = \bar{t}$. Porém, como vemos nas tabelas 6 e 7, este valor não deverá ser atingido se considerarmos os 19 problemas propostos, já que não temos a resolução de todos os problemas para nenhum método. A escolha de $m_{s,p} = 10^5$ quando o método s não resolve o problema p foi feita para $\rho_s(t) = 1$ não ser atingida em $1 \leq t \leq t_{max}$, com 1 e t_{max} os limitantes para a construção do gráfico, se o método falhou na resolução de algum problema.

Para a análise dos gráficos de *performance profile* consideramos dois conjuntos de problemas. O primeiro com os 19 problemas apresentados nas tabelas 6 e 7. O segundo conjunto contém 10 problemas (1,2,3,4,5,6,7,8,12,14), com o objetivo de compararmos os métodos

apenas quando convergem para o mesmo tipo de solução.

A primeira comparação feita será entre os métodos clássicos apresentados: o método de máxima descida (com bissecção e com os passos propostos por Barzilai e Borwein) e o método de Gauss-Newton (com passo puro e com bissecção). Os gráficos para os 19 e os 10 problemas estão mostrados na figura 4.

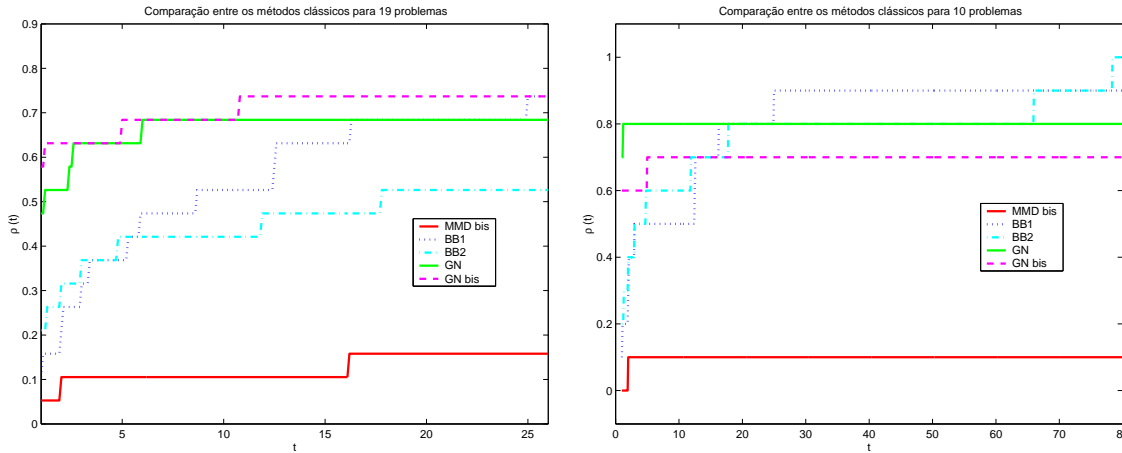


Figura 4 - Gráficos de *performance profile* para os métodos clássicos com 19 e 10 problemas respectivamente.

Pelos gráficos notamos o melhor desempenho do método de Gauss-Newton ao analisar $t = 1$, indicando a resolução de um maior número de problemas com o mínimo de iterações obtido para aquele problema. Além disso, para o caso de 19 problemas considerados, o método de Gauss-Newton com bissecção resolve um maior número de problemas (cerca de 74%). Considerando apenas os 10 problemas em que obtivemos convergência para a mesma solução, o método de máxima descida com o segundo passo proposto por Barzilai e Borwein resolve todos os problemas, o que não acontece com os demais métodos. Entretanto, a convergência deste método para alguns problemas é lenta, como podemos notar pelo segundo gráfico com a resolução de 90% dos problemas apenas a partir de $t \simeq 65$.

A média de avaliações de função por iteração para os métodos com bissecção, considerando os 19 problemas, foi 10.54 para o método de máxima descida e 5.99 para o método de Gauss-Newton. O maior número de avaliações de função por iteração para o método de máxima descida com bissecção foi 27.49 para o problema 19. Já para o método de Gauss-Newton com bissecção, obtivemos como maior valor 51.92 avaliações de função por iteração para o problema 7. Vemos assim uma dispersão maior para Gauss-Newton do que para máxima descida.

De uma forma geral, os passos propostos por Barzilai e Borwein são comparáveis entre si, o método de máxima descida com bissecção é o que resolve menos problemas com mais iterações e o método de Gauss-Newton apresentou o melhor desempenho com um número menor de iterações para os problemas em que a solução é obtida.

Após comparar os métodos clássicos, o próximo passo é analisar o desempenho da nova direção proposta e suas modificações apresentadas na seção 3.1.3, com a salvaguarda para

garantir que a direção seja de descida e com a determinação do passo através de uma busca linear não monótona, além da nova direção proposta na seção 3.1.4.

O primeiro gráfico da figura 4 apresenta o desempenho destas quatro propostas considerando o resultado dos 19 problemas testados. Não analisaremos os seus desempenhos para apenas 10 problemas por apresentarem resultados parecidos para estes casos, com a nova direção original e sua primeira modificação convergindo em apenas 3 problemas, com o mesmo número de iterações, e a nova direção com busca não monótona convergindo em apenas 1 problema.

Para os 19 problemas, percebemos pelo primeiro gráfico da figura 5 um melhor desempenho para a nova direção com sua proposta original e para a nova direção apresentada na seção 3.1.4 resolvendo cerca de 36% dos problemas, levando em consideração que, sem a garantia destas direções serem de descida, a solução obtida pode ser um ponto de máximo. Entretanto, este valor não supera o número de problemas resolvidos por BB1 (74%), BB2 (63%) e Gauss-Newton com passo puro (68%) e com bissecção (74%). No segundo gráfico da figura 5 temos a comparação entre a nova direção e o método do gradiente com bissecção e com os passos propostos por Barzilai e Borwein para os 19 problemas. Notamos que a nova direção é superior apenas quando comparada ao método de máxima descida com bissecção. Porém, para os problemas testados em que a nova direção obteve convergência, esta ocorre sempre com um número de iterações inferior ao dos outros métodos.

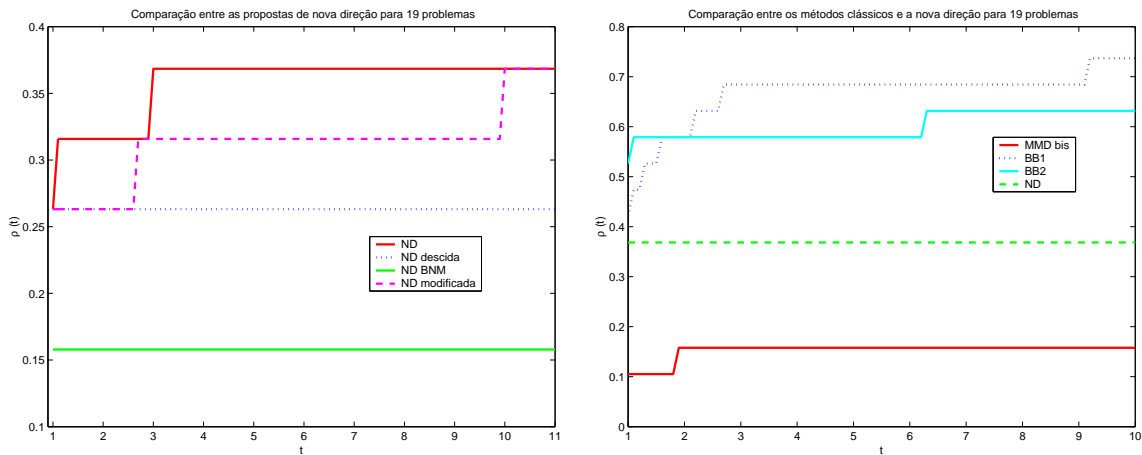


Figura 5 - Gráficos de *performance profile* para as quatro propostas da nova direção e para a comparação da nova direção com o método de máxima descida com bissecção e com os passos propostos por Barzilai e Borwein.

A etapa seguinte é a comparação do método de máxima descida com os passos propostos por Barzilai e Borwein e com as novas propostas de passos apresentadas nas seções 3.1.2 e 3.1.4. Na figura 6 estão apresentados os gráficos comparativos para 19 e 10 problemas.

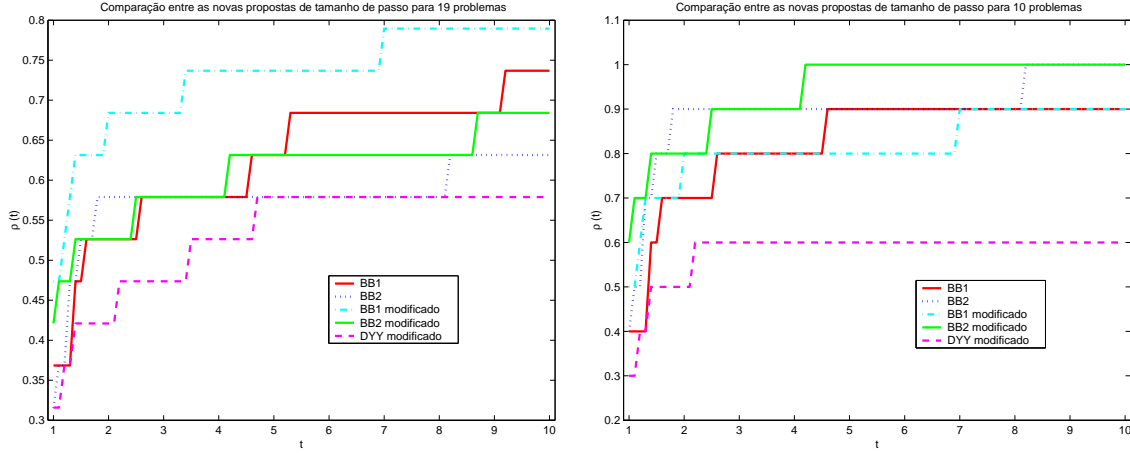


Figura 6 - Gráficos de *performance profile* para o método de máxima descida com os novos passos propostos.

Para os 19 problemas, temos o melhor desempenho do método com a modificação para o primeiro passo proposto por Barzilai e Borwein. Apesar da avaliação extra do gradiente a cada iteração, alguns problemas apresentaram uma convergência bem mais rápida, como podemos notar nas tabelas 6 e 7 observando o número de iterações para os problemas 10 e 15 obtidas por BB1 (82 e 805 iterações) e BB1 modificado (9 e 152 iterações respectivamente). Já para o conjunto de apenas 10 problemas, a modificação para o segundo passo proposto por Barzilai e Borwein supera os demais métodos.

A modificação feita para a proposta de Dai, Yuan e Yuan não se mostrou muito eficiente para este conjunto de problemas.

De uma forma geral, as modificações apresentadas na seção 3.1.2 obtiveram um melhor desempenho quando comparadas às propostas originais de Barzilai e Borwein.

Após o estudo destas 19 funções, passamos a testar os métodos com uma função que aparece no contexto de um problema de valor de contorno, sendo definida em [10] por *Discrete boundary value function*. O estudo desta função foi guiado por Moré e Cosnard [9].

Escolhemos esta função com o objetivo de testar o desempenho da nova direção para uma função com uma matriz jacobiana de estrutura tridiagonal.

O problema original de valor de contorno tem como dados:

$$u''(t) = \frac{1}{2}(u(t) + t + 1)^3 \quad \text{com } 0 < t < 1 \text{ e } u(0) = u(1) = 0 .$$

Através de uma discretização do intervalo $0 < t < 1$ e fazendo $x_i = u(t_i)$, com $i = 1, \dots, n - 1$, obtemos o sistema de equações não lineares de dimensão n :

$$F(x) = 0 , \tag{51}$$

onde $F_i(x) = 2x_i - x_{i+1} - x_{i-1} + \frac{1}{2}h^2(x_i + t_i + 1)^3$ com $h = 1/(n+1)$, $t_i = ih$ e $x_0 = x_{n+1} = 0$. Estamos interessados em encontrar $x^* \in \mathbb{R}^n$ solução de (51), o que é equivalente a resolver o problema de quadrados mínimos

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{com } f(x) = F(x)^T F(x) .$$

Para testar os métodos estudados utilizamos $n = 10$ e três pontos iniciais (x^0) diferentes. O primeiro ponto é sugerido em Moré, Garbow e Hillstrom ($x_j^0 = \xi_j$, com $\xi_j = t_j(t_j - 1)$). Para o segundo teste escolhemos $x^0 = (0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{10}$. O terceiro ponto inicial foi criado a partir de uma perturbação para o ponto sugerido: $x_j^0 = \xi_j + a$, com a um número aleatoriamente gerado entre -0.1 e 0.1 .

O objetivo destas três escolhas é observar a sensibilidade dos métodos com a alteração do ponto inicial para esta função.

Na tabela 8 apresentamos os resultados dos testes indicando o número de iterações para cada método e a convergência (C) ou a não convergência (N) do método.

Tabela 8. Resultados obtidos pelos métodos estudados com a alteração do ponto inicial

Método	x^0 sugerido		$x^0 = (0, \dots, 0)$		$x_j^0 = \xi_j + a$	
MMD bis	1000	N	1000	N	1000	N
BB1	598	C	365	C	445	C
BB1 mod	353	C	345	C	401	C
DYY mod	372	C	561	C	330	C
BB2	313	C	437	C	313	C
BB2 mod	358	C	395	C	408	C
GN	3	C	3	C	3	C
GN bis	3	C	3	C	3	C
ND	1000	N	1000	N	1000	N
ND desc	1000	N	1000	N	1000	N
ND BNM	1000	N	1000	N	1000	N
ND mod	88	N	88	N	45	N

Pelos resultados percebemos que a alteração do ponto inicial não comprometeu o padrão de convergência dos métodos. Os melhores resultados foram alcançados pelo método de Gauss-Newton com passo puro e com bissecção. Os passos propostos por Barzilai e Borwein, assim como os novos passos, apresentaram convergência em todos os casos testados. A nova direção, em suas versões original, com descenso assegurado e com busca não monótona, não apresentou um bom resultado, atingindo o número máximo de iterações estabelecido. A nova direção modificada apresentou erro antes da centésima iteração.

Para os métodos que obtiveram 1000 iterações com o ponto inicial sugerido, fizemos alguns gráficos comparativos de $t_i \times x_i$ com o objetivo de verificar a proximidade da solução obtida com o ponto inicial ou com a solução verdadeira (tomaremos como referência a solução obtida por Gauss-Newton). Os gráficos estão apresentados na figura 7.

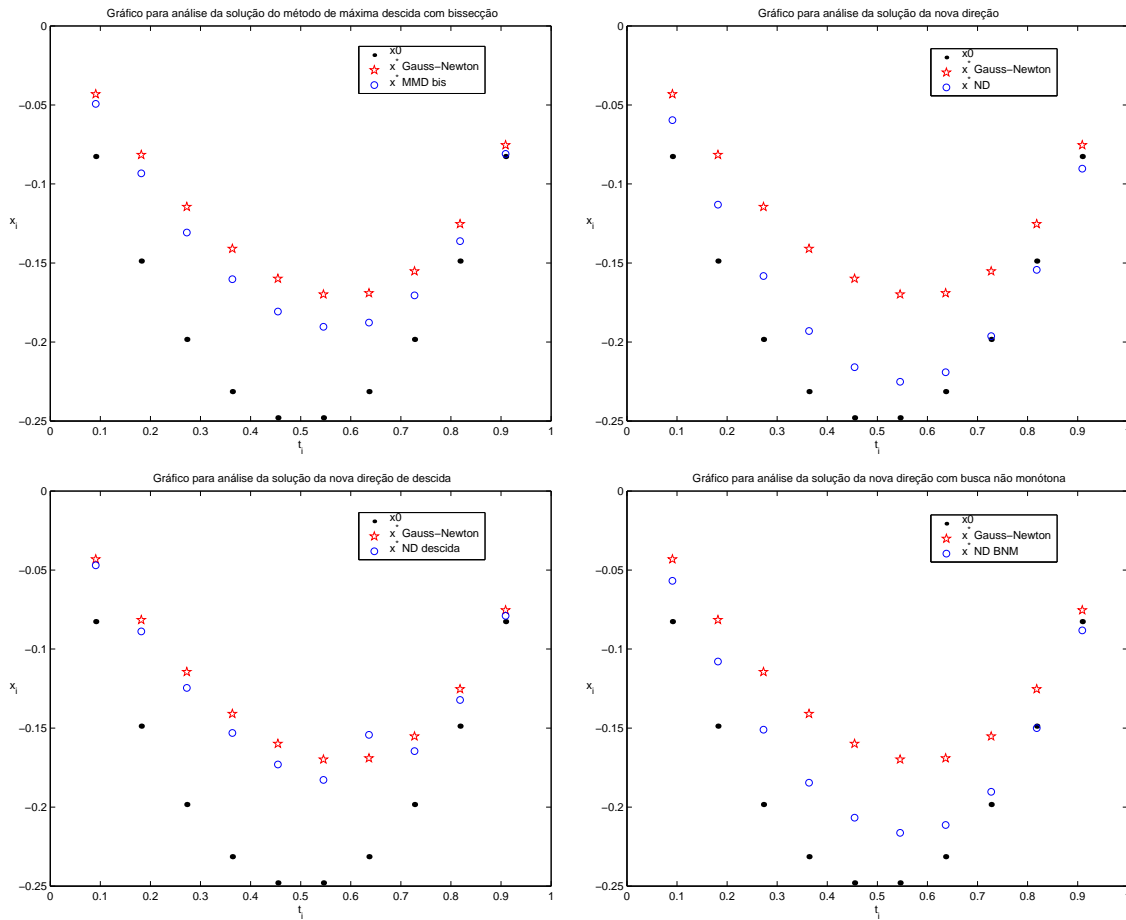


Figura 7 - Gráficos comparativos de $t_i \times x_i$ para os métodos que apresentaram 1000 iterações.

Através dos gráficos percebemos que o método de máxima descida com bissecção está convergindo lentamente para a solução, se aproximando da solução obtida pelo método de Gauss-Newton. Entre as três propostas para a nova direção, a que utiliza a salvaguarda para caracterizar a direção como de descida (ND desc) se aproxima mais da solução para o problema. Já a nova direção original e a nova direção com busca linear não monótona, após 1000 iterações, têm como solução um ponto mais próximo do ponto inicial do que da solução verdadeira.

Após os testes realizados para esta função tridiagonal, utilizamos funções não lineares com matriz Hessiana diagonal, com o objetivo de analisar o comportamento da nova direção proposta para problemas com esta estrutura.

O primeiro problema de quadrados mínimos testado foi para a função objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$f(x) = x_1^2 + x_2^4 + \dots + x_n^{2n} . \quad (52)$$

Os resultados estão apresentados na tabela 9, onde C indica convergência, N indica não convergência pelo método, $*$ indica que a norma do gradiente no ponto final está entre 10^{-5} e 10^{-4} e $**$ indica que a norma do gradiente no ponto final entre 10^{-8} e 10^{-6} . O

ponto inicial utilizado foi o vetor de dimensão n com todas as componentes iguais a 1.

Tabela 9. Resultados para o problema com função objetivo dada por (52)

Método	Dimensão			
	2	3	6	10
MMD bis	2 C	1000 N	1000 N	1000 *
BB1	42 C	48 C	87 C	132 C
BB1 mod	35 C	44 C	62 C	180 C
DYY mod	33 C	41 C	63 C	90 C
BB2	40 C	48 C	78 C	120 C
BB2 mod	35 C	45 C	68 C	99 C
GN	10 C	11 C	11 C	12 C
GN bis	10 C	11 C	11 C	12 C
ND	26 C	31 C	33 C	34 *
ND desc	26 C	31 C	33 C	34 *
ND BNM	22 C	28 C	1000 **	1000 **
ND mod	22 N	45 *	1000 N	1000 N

Para estes problemas percebemos um bom desempenho para a nova direção, superando o método de máxima descida com os passos propostos por Barzilai e Borwein e suas modificações.

A proposta original da nova direção (ND) caracterizou-se como de descida em todas as iterações, coincidindo com ND desc. A nova direção com busca não monótona convergiu em menos iterações para os problemas de dimensão 2 e 3 quando comparada a ND e ND desc. Para o problema de dimensão 10, ND e ND desc obtiveram 34 iterações e ND BNM obteve 1000 iterações. Porém, a norma do gradiente no ponto final é menor para ND BNM.

A nova direção modificada (ND mod) não obteve um bom desempenho para os problemas testados.

A segunda função com matriz Hessiana diagonal testada foi

$$f(x) = x_1^2 + (x_2(1 - \text{sen}(x_2)))^2. \quad (53)$$

Este problema possui vários pontos de mínimo global. Para analisar a convergência dos métodos para diferentes pontos, realizamos alguns testes alterando o ponto inicial, com os resultados mostrados na tabela 10.

Tabela 10. Resultados para o problema com função objetivo dada por (53)

Método	Ponto inicial			
	$(1, 1)^T$	$(1, 1.6)^T$	$(-1, -1)^T$	$(8, 8)^T$
MMD bis	1000 N	1000 N	1000 N	1000 N
BB1	26 C	20 C	32 C	32 C
BB1 mod	31 C	17 C	25 C	26 C
DYY mod	29 C	17 C	25 C	24 C
BB2	33 C	18 C	29 C	31 C
BB2 mod	28 C	14 C	27 C	24 C
GN	8 C	5 C	5 C	9 C
GN bis	8 C	5 C	5 C	9 C
ND	18 C	12 C	19 C	18 C
ND desc	18 C	12 C	19 C	18 C
ND BNM	18 C	12 C	19 C	18 C
ND mod	17 N	15 N	8 N	972 *

Novamente, a nova direção apresentou um bom desempenho para problemas com Hessiana diagonal.

Para este conjunto de testes, ND, ND desc e ND BNM coincidem, não sendo ativada nenhuma salvaguarda de ND desc e ND BNM para a mudança da direção e do tamanho do passo.

A nova direção realizou sempre o menor número de iterações quando comparada aos outros métodos, com exceção de GN e GN bis.

Para os pontos iniciais $(1, 1)^T$ e $(1, 1.6)^T$, a solução de todos os métodos que obtiveram convergência foi uma aproximação para a solução $(0, 1.5708)^T$. Já para os pontos iniciais $(-1, -1)^T$ e $(8, 8)^T$, o resultado é uma aproximação para a solução $(0, 7.8540)^T$, com exceção de GN e GN bis que convergem para $(0, 0)^T$ quando $x^1 = (-1, -1)^T$.

Com o objetivo de analisar o comportamento da nova direção para problemas com Hessiana diagonal de maior dimensão, o próximo problema testado foi $\min F(x)^T F(x)$ tal que

$$F_i(x) = \begin{cases} x_i(1 - \text{sen}(x_i)) , & \text{se } i \text{ é ímpar} \\ 1 - x_i \text{sen}(x_i) \cos(x_i) , & \text{se } i \text{ é par,} \end{cases} \quad (54)$$

com $i = 1, \dots, n$.

Os resultados estão apresentados na tabela 11, para os quais o ponto inicial adotado foi o vetor de dimensão n com todas as componentes iguais a 1.

Tabela 11. Resultados para o problema $\min F(x)^T F(x)$ para F dada por (54)

Método	Dimensão				
	2	5	10	20	100
MMD bis	1000 *	1000 *	1000 *	1000 *	1000 N
BB1	54 C	60 C	56 C	56 C	67 C
BB1 mod	40 C	47 C	44 C	44 C	44 C
DYY mod	50 **	55 **	48 **	52 **	57 *
BB2	50 C	53 C	55 C	55 C	55 C
BB2 mod	41 C	45 C	44 C	44 C	50 C
GN	8 C	8 C	8 C	9 C	9 C
GN bis	9 C	9 C	9 C	10 C	10 C
ND	18 C	19 C	19 C	21 C	21 C
ND desc	18 C	19 C	19 C	21 C	21 C
ND BNM	18 C	19 C	19 C	1000 **	1000 **
ND mod	9 N	89 C	9 N	9 N	9 N

Para este conjunto de testes notamos o melhor desempenho da nova direção, superando os demais métodos, com exceção do método de Gauss-Newton.

A nova direção foi de descida em todas as iterações, o que fez ND coincidir com ND desc. Para os problemas de dimensões menores, ND BNM também coincide com ND e ND desc. Mas para os testes de dimensão 20 e 100, ND BNM não obteve o mesmo desempenho da nova direção original, realizando o número máximo de iterações.

A nova direção modificada não apresentou um bom desempenho, obtendo a solução apenas para o problema de dimensão 5.

Comparando o método de máxima descida com os passos propostos por Barzilai e Borwein e com as modificações propostas, temos o melhor desempenho de BB1 mod e BB2 mod. Outro fato importante foi a convergência dos métodos para um ponto de mínimo local, com exceção do método de Gauss-Newton que obteve, em todos os casos, a convergência para um ponto de mínimo global, com o valor final da função objetivo próximo de zero.

De uma forma geral, percebemos o bom desempenho da nova direção para problemas bidimensionais e problemas de maior dimensão com matriz Hessiana diagonal.

Testes no NEOS-server

Também fizemos a submissão eletrônica de alguns problemas ao NEOS-server, com a implementação das funções em *Fortran*. Escolhemos os problemas 9,10,11,13,15,16,17,18 e 19 de [10] por terem apresentado soluções que não eram as esperadas segundo Moré, Garbow e Hillstrom, casos em que indicamos por C^* nas tabelas 6 e 7. Submetemos também a função 5, que serviu para validar os procedimentos.

Para a minimização irrestrita de funções uma das opções do NEOS-server é o NMTR, que utiliza o método de Newton com região de confiança (ver [8]). Como tolerâncias para o critério de parada adotamos para o erro absoluto no valor da função objetivo (*fatol*) 10^{-16} ,

para o erro relativo (*firtol*) 10^{-16} e para o valor mínimo da função -10^{30} . Outro critério de parada utilizado é a obtenção do número máximo de avaliações de função (*max fev*) 20000.

Na tabela 12 apresentamos o número de iterações, o valor da norma do gradiente avaliado no ponto final, o critério de parada satisfeito e a indicação da convergência (*C*) ou não convergência (*N*) para os pontos sugeridos em Moré, Garbow e Hillstrom.

Tabela 12. Resultados dos problemas submetidos ao NEOS-server

Problema	Iterações	Norma do gradiente	Critério de parada	Convergência
5	14	0.686e-21	FATOL	C
9	11	0.103e-13	FRTOL	C
10	211	0.464e-03	FRTOL	C
11	16	0.134e-07	FATOL	N
13	10	0.274e-11	FRTOL	C
15	12	0.332e-14	FATOL	C
16	8	0.375e-13	FATOL	C
17	19721	0.316e-01	MAX FEV	N
18	15	0.152e-07	FATOL	C
19	92	0.108e-06	FATOL	C

Como resultado da submissão ao NEOS-server, temos a resolução da maioria dos problemas (80%), convergindo para os pontos de mínimo sugeridos em [10].

Com o critério de parada baseado no valor da função objetivo em cada iteração temos, em alguns casos, o valor da norma do gradiente avaliado no ponto final maior que 10^{-8} , que era a tolerância para o critério de parada adotado anteriormente na resolução pelos métodos estudados e implementados em *Matlab*. Além disso, no NEOS-server é utilizado um critério de parada baseado em erros relativos para a resolução, dificultando a comparação com os métodos testados anteriormente. Percebemos, no entanto, que a utilização de um critério de parada relativo é vantajosa, pois o mal escalamento presente em alguns problemas pode dificultar a obtenção de valores muito pequenos para a norma do erro absoluto, mesmo estando numa vizinhança da solução desejada.

4 Considerações finais

Apresentamos neste relatório métodos clássicos e novas propostas para direções e tamanho de passo para a resolução de problemas de minimização irrestrita. Trabalhamos com problemas quadráticos e de quadrados mínimos não lineares. Para estas duas famílias de problemas fizemos vários conjuntos de experimentos numéricos comparativos para situar o desempenho das propostas apresentadas no contexto dos métodos já conhecidos. Combinamos a apresentação de resultados na forma de tabelas e gráficos, acompanhados de uma análise cuidadosa dos resultados obtidos.

Comparando o desempenho dos métodos para problemas quadráticos temos que a nova

direção proposta supera os demais métodos para problemas bidimensionais e para problemas de maior dimensão com matriz Hessiana diagonal. Para os outros problemas quadráticos o melhor desempenho é obtido pelo método Cauchy-Barzilai-Borwein.

Para os problemas de quadrados mínimos não lineares com matriz Hessiana diagonal, a nova direção supera os demais métodos, com exceção do método de Gauss-Newton. Para os problemas mais gerais, o melhor desempenho é alcançado pelo o método de Gauss-Newton, seguido do método de máxima descida com dois novos passos originados de modificações feitas para os passos de Barzilai e Borwein.

Os passos de Barzilai e Borwein são comparáveis entre si, superando o método de máxima descida com busca linear exata para problemas quadráticos e com bissecção para problemas não lineares.

De uma maneira geral, as novas direções propostas neste trabalho, cuja definição incorpora naturalmente o tamanho do passo, se destacaram para problemas quadráticos bidimensionais e para problemas com variáveis separáveis (Hessiana diagonal), tanto quadráticos quanto não lineares. O desempenho da nova direção para tais problemas superou o dos demais métodos. Vale dizer que nossos esforços no sentido de globalizar a nova direção não se reverteram em um algoritmo eficiente do ponto de vista prático. Nem mesmo a busca não monótona de Grippo, Lampariello e Lucidi favoreceu o desempenho do algoritmo globalizado proposto. Provavelmente, a maneira com que construímos as salvaguardas tenha sido muito conservadora, o que provocou um comportamento análogo ao método de máxima descida globalizado: embora a convergência a um ponto estacionário esteja assegurada para qualquer inicialização, nada se garante com relação à velocidade dessa convergência.

Com inspiração nos artigos de Barzilai e Borwein [1], Raydan e Svaiter [11] e Dai, Yuan e Yuan [2], propusemos novas escolhas para o tamanho do passo, para serem usadas com a direção de máxima descida, originadas de modificações para os passos de Barzilai e Borwein. O desempenho dos métodos originados destas novas escolhas superou o dos demais métodos para os problemas mais gerais considerados neste trabalho.

Referências

- [1] J. Barzilai & J. Borwein, Two-point step size gradient methods, *IMA Journal of Numerical Analysis*, Vol. 8, pp. 141-148, 1988.
- [2] Y. Dai, J. Yuan & Y. Yuan, Modified Two-point stepsize gradient methods for unconstrained optimization, *Computational Optimization and Applications*, 22-1, pp. 103-109, 2002.
- [3] J. E. Dennis & R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, 1983.
- [4] E. D. Dolan & J. J. Moré, Benchmarking optimization software with performance profiles, *Mathematical Programming*, Vol. 91, pp. 201-213, 2002.
- [5] A. Friedlander, *Elementos de Programação Não-Linear*, Editora da Unicamp, 1994.

- [6] L. Grippo, F. Lampariello & S. Lucidi, A nonmonotone line search technique for Newton's method, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, Vol. 23, pp. 707-716, 1986.
- [7] D. G. Luenberger, *Linear and Nonlinear Programming*, 2 ed., Addison-Wesley, 1984.
- [8] J. M. Martínez & S. A. Santos, *Métodos Computacionais de Otimização*, IMPA, 20 Colóquio Brasileiro de Matemática, Rio de Janeiro: SBM, 1995.
- [9] J. J. Moré & M. Y. Cosnard, Numerical Solution of Nonlinear Equations, *ACM Trans. Math. Software*, Vol. 5, pp.64-85, 1979.
- [10] J. J. Moré, B. S. Garbow & K. E. Hillstom, Testing Unconstrained Optimization Software, *ACM Trans. Math. Software*, Vol. 7, pp. 17-41, 1981.
- [11] M. Raydan & B. F. Svaiter, Relaxed Steepest Descent and Cauchy-Barzilai-Borwein Method, *Computational Optimization and Applications*, Vol. 21, pp. 155-167, 2002.
- [12] M. Raydan, The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem, *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 7, pp. 26-33, 1997.