

ANA LUÍSA CUSTÓDIO

APLICAÇÕES DE DERIVADAS SIMPLÉCTICAS EM
MÉTODOS DE PROCURA DIRECTA

Lisboa

2007

Número de arquivo
Copyright

ANA LUÍSA CUSTÓDIO

APLICAÇÕES DE DERIVADAS SIMPLÉCTICAS EM
MÉTODOS DE PROCURA DIRECTA

Dissertação apresentada para obtenção
do Grau de Doutor em Matemática, es-
pecialidade de Investigação Operacio-
nal, pela Universidade Nova de Lisboa,
Faculdade de Ciências e Tecnologia

Lisboa
2007

Agradecimentos

O percurso que conduziu à escrita desta dissertação foi longo, mas recompensador. Não só pelo resultado final, mas sobretudo pela aprendizagem e pelas pessoas que encontrei pelo caminho.

Iniciou-se em 2000, ainda enquanto aluna de mestrado, quando o Professor Joaquim João Júdice, da Universidade de Coimbra, me apresentou à Optimização Não Linear. O meu sincero agradecimento por essas aulas e por, mais tarde, me ter sugerido, quando pensei fazer investigação nesta área, que contactasse o Professor Luís Nunes Vicente.

Trabalhar com o Professor Luís Nunes Vicente, enquanto estudante de doutoramento, foi um desafio recompensador. A excelência e a exigência são duas das palavras que melhor encontro para descrever o seu trabalho enquanto meu orientador. O meu profundo obrigado pela sua disponibilidade, pelo seu entusiasmo, pelo seu apoio e sobretudo pela já referida exigência. Foi o que me fez crescer, não só como matemática mas também como pessoa.

Ao Professor Ruy Araújo da Costa, da Universidade Nova de Lisboa, agradeço a confiança que sempre depositou em mim e o apoio na ligação entre esta universidade e a Universidade de Coimbra.

O meu agradecimento ao Professor António Pinto da Costa, do Instituto Superior Técnico da UTL, e ao Professor João Fernandes, da Universidade de Coimbra, por terem disponibilizado os códigos computacionais relativos aos problemas que constituem o capítulo de aplicações desta dissertação. Em particular, agradeço o entusiasmo que o Professor João Fernandes sempre demonstrou na aplicação de métodos de Optimização Sem Derivadas à área da Astrofísica.

Um obrigada muito especial ao Professor Ismael Vaz, da Universidade do Minho, pela sua solicitude. Sem a sua intervenção, a ligação entre o código do Professor João Fernandes e o `Matlab` teria sido muito mais complicada.

Durante os anos em que realizei investigação, com vista à redacção desta dissertação, tive a oportunidade de visitar alguns dos maiores especialistas na área da Optimização Sem Derivadas. Deixo o meu agradecimento aos Professores Virginia Torczon e Robert Michael Lewis, do College of William & Mary, ao Professor John Dennis Jr., da Rice University, e aos Professores Annick Sartenar e Philippe Toint, das FUNDP de Namur, pelos comentários

estimulantes e as agradáveis discussões científicas que tivemos.

Agradeço, ainda, aos colegas e amigos da FCT-UNL. Em particular, agradeço à Lourdes Afonso, à Maria do Carmo Brás, à Gracinda Guerreiro, ao Nelson Martins, ao Paulo Matos e à Isabel Gomes Salema. É bom sentir que não estamos sozinhos.

Ao Departamento de Matemática e à FCT-UNL agradeço as condições que me proporcionaram e que permitiram a realização do trabalho que conduziu à escrita desta dissertação. Em particular, o meu muito obrigada pelo período em que fui dispensada das actividades de docência. Ao Departamento de Matemática da FCTUC e ao Centro de Matemática da Universidade de Coimbra agradeço todo o apoio logístico que me foi prestado ao longo destes anos. Agradeço, ainda, o apoio financeiro que recebi da Fundação Calouste Gulbenkian e da Fundação para a Ciência e Tecnologia, neste último caso através do projecto POCI/MAT/59442/2004 intitulado “Optimização Sem Derivadas e Aplicações”.

Aos meus Pais, o meu muito obrigada pela educação que me deram e, sobretudo, pelos valores que me transmitiram. É um orgulho ser vossa filha! Um obrigado especial à minha Mãe, que me substituiu nas funções de ‘mamã’ durante as minhas ausências.

Ao Alexandre, meu filho, um pedido de desculpa pelas vezes que os “sapos não deixaram a mamã passar”. Obrigada pelo teu riso, pelas tuas traquinices e pelos teus beijinhos. Por último, mas não com menos importância, um obrigada ao António. Sempre foste o meu equilíbrio, a minha segurança, a minha razão. O amor não se agradece. Apenas se corresponde.

Resumo

O trabalho de investigação, conducente à redacção desta dissertação, teve como principal objectivo a utilização de derivadas simplécticas na definição de estratégias que aumentem a eficiência dos algoritmos de procura directa direccional e, também, no desenvolvimento de novos algoritmos para Optimização Sem Derivadas.

A robustez, a simplicidade e a fácil implementação dos métodos de procura directa direccional são algumas das características que justificam a sua utilização frequente na minimização de funções resultantes de aplicações. Contudo, estes algoritmos são, em geral, pouco eficientes. Embora esta eficiência possa ser aumentada com a utilização de técnicas de optimização sub-rogada no passo de procura dos algoritmos, o processo de amostragem inerente ao passo de sondagem é responsável, parcialmente, pelo desempenho lento desta classe de métodos de optimização.

Nesta dissertação, propõem-se várias estratégias para melhorar a eficiência de um método de procura directa direccional, utilizando os conjuntos de pontos onde a função objectivo é avaliada durante o processo de minimização. Em cada iteração destes métodos, é possível tentar identificar subconjuntos de pontos previamente avaliados com boas propriedades geométricas, que permitam a construção de derivadas simplécticas de boa qualidade.

A qualidade das derivadas simplécticas, e em particular dos gradientes simplécticos, quando calculadas a partir de conjuntos de pontos com boa geometria, é conhecida no caso continuamente diferenciável. Nesta dissertação, generalizam-se estes resultados a funções não suaves, no contexto dos métodos de procura directa direccional.

Recorrendo às derivadas simplécticas, são construídos indicadores de descida com boa qualidade, que são utilizados nas várias iterações de um método de procura directa direccional, para, por exemplo, induzir uma ordenação na amostragem da função objectivo no passo de sondagem do algoritmo. Estes indicadores de descida simplécticos podem ter outras aplicações, nomeadamente na definição de um passo de procura, na actualização do comprimento do passo, ou na definição de um critério de paragem.

Estas estratégias são descritas pormenorizadamente e testadas numericamente num conjunto de funções continuamente diferenciáveis pertencentes à colecção CUTer [49] e num conjunto de funções não suaves recolhidas da literatura de Optimização Não Suave. As

diferentes estratégias são ainda testadas na resolução de dois problemas aplicados: um proveniente da Mecânica Computacional, relacionado com a simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito, e outro resultante da calibração de parâmetros estelares em Astrofísica. Os resultados numéricos comprovam que a introdução de estratégias baseadas em derivadas simplécticas melhora, significativamente, o desempenho algorítmico da procura directa direccional.

Nesta dissertação, propõem-se ainda dois novos algoritmos, baseados em derivadas simplécticas, para Optimização Sem Derivadas: um método de procura directa direccional curvilínea e um método híbrido de procura directa e unidireccional. São analisadas as propriedades de convergência global de ambos os algoritmos.

Abstract

The main goal of the research reported in this thesis was the use of simplex derivatives based strategies to improve the efficiency of existing directional direct search methods and to develop new algorithms for Derivative-Free Optimization.

Directional direct search methods are widely use in practice, due to their robustness, simplicity, and easy implementation. However, these algorithms are most of the times very slow. Although this efficiency can be improved by applying surrogate-based optimization to the so-called search step of the methods, the sampling process inherent to their poll step is partially responsible for the slow performance observed in practice.

In this thesis, we introduce a number of ways of making directional direct search methods more efficient by reusing previous evaluations of the objective function. At each iteration, one can attempt to compute accurate simplex derivatives by identifying a sampling set of previously evaluated points with good geometrical properties.

The quality of simplex derivatives, and in particular of simplex gradients, computed from sets with good geometry, is already known in the continuously differentiable case. In this work, we extend these results to nonsmooth functions, in a directional direct search framework.

The simplex derivatives can be used to compute good quality descent indicators, which in turn can be used, for instance, to reorder the evaluations of the objective function associated with the directions used in the poll step. These simplex descent indicators can also be used to define a search step, to update the step size parameter, or to establish a stopping criterion.

We present these procedures in detail and apply them to a set of problems which includes a set of continuously differentiable functions from the CUTEr [49] collection, and a set of nonsmooth functions collected from Nonsmooth Optimization papers. The strategies are also tested in two applications problems: one arising in Computational Mechanics, related to the simulation of a mechanical system with potential contact and friction, and another resulting from the adjustment of stellar modeling parameters in Astrophysics. Numerical results show that the strategies based on simplex derivatives can enhance significantly the practical performance of directional direct search methods.

In this dissertation we also propose two new algorithms, based on simplex derivatives, for

Derivative-Free Optimization: a curvilinear directional direct search method and a hybrid direct-line search method. A global convergence analysis is presented for both algorithms.

Notações

$\mathbb{N}$	conjunto dos números naturais
$\mathbb{N}_0$	conjunto dos números inteiros não negativos
$\mathbb{Z}$	conjunto dos números inteiros
$\mathbb{Z}^-$	conjunto dos números inteiros negativos
$\mathbb{Q}$	conjunto dos números racionais
$\mathbb{R}$	conjunto dos números reais
$\mathbb{R}_0^+$	conjunto dos números reais não negativos
$ \cdot $	aplicação módulo
$\ \cdot\ $	aplicação norma Euclideana
$ X $	cardinalidade do conjunto X
$\nabla f(x)$	gradiente da função f , calculado no ponto x
$\nabla^2 f(x)$	Hessiana da função f , calculada no ponto x
$f^\circ(x; v)$	derivada direcciona generalizada de Clarke da função f , calculada no ponto x , na direcção v
$\partial f(x)$	(conjunto) subdiferencial generalizado de Clarke, calculado no ponto x
$s(x)$	elemento do conjunto subdiferencial generalizado de Clarke, calculado no ponto x
$g, \nabla_s f(x)$	gradiente simpléctico da função f , calculado no ponto x
$H, \nabla_s^2 f(x)$	Hessiana simpléctica da função f , calculada no ponto x
S	matriz que representa os vectores que unem um ponto de um conjunto simpléctico aos restantes, $S = [y^1 - y^0 \cdots y^n - y^0]$
$\delta(f; S)$	vector que representa a diferença, nos valores de f , entre os pontos considerados em S , $\delta(f; S) = [f(y^1) - f(y^0) \cdots f(y^n) - f(y^0)]^\top$
γ_f	constante de Lipschitz para a função f
$\gamma_{\nabla f}$	constante de Lipschitz para o gradiente da função f
I	matriz identidade
e_i	i -ésima coluna da matriz identidade
e	vector com todas as componentes iguais a 1
x_k	iterada k gerada por um algoritmo

α_k	comprimento do passo na iteração k de um algoritmo
D_k	conjunto gerador positivo considerado na iteração k de um método de procura directa direcciona
$\kappa(D_k)$	medida do coseno do conjunto gerador positivo D_k
M_k	grelha considerada na iteração k de um método de procura directa direcciona
$V_k, V(x_k)$	‘vizinhança’ da iterada x_k , considerada na iteração k de um método de procura directa direcciona
Λ	constante de equilíbrio- Λ
$\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$	região de confiança centrada em x_k com raio Δ_k ; nesta tese, $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k) = \{x \in \mathbb{R}^n : \ x - x_k\ \leq \Delta_k\}$
X_k	lista de pontos a utilizar na identificação de conjuntos em equilíbrio- Λ
Y_k	conjunto de pontos em equilíbrio- Λ a utilizar na construção das derivadas simplécticas
ι_k	indicador de descida simpléctico
$J^\epsilon(g)$	conjunto dos índices das componentes ϵ -grandes do vector g
$\mathbb{A}(-\nabla f(x))$	conjunto das direcções ascendentes no ponto x
Ω	região admissível de um problema de optimização
$f_\Omega(x)$	função de barreira
$I(x; \epsilon)$	conjunto dos índices das restrições ϵ -activas no ponto x
$T(x; \epsilon)$	cone tangente definido pelas restrições ϵ -activas no ponto x
$N(x; \epsilon)$	cone normal definido pelas restrições ϵ -activas no ponto x

Demonstrações Originais

Proposição 3.1.4	pág. 38
Teorema 5.4.1	pág. 78
Proposição 5.4.1	pág. 80
Teorema 5.5.1	pág. 81
Lema 6.1.1	pág. 98
Teorema 6.1.1	pág. 99
Teorema 6.1.2	pág. 100
Corolário 6.1.1	pág. 101
Teorema 6.1.3	pág. 102
Teorema 7.3.2	pág. 115
Teorema 7.3.3	pág. 118
Lema 7.5.1	pág. 122
Teorema 7.5.1	pág. 125

Conteúdo

1	Introdução	21
1.1	Considerações gerais	21
1.2	As contribuições desta dissertação	22
1.3	Organização da dissertação	23
2	Breve introdução à Optimização Sem Derivadas	25
2.1	A classe de problemas de optimização	25
2.2	Algumas áreas de aplicação	26
2.3	Alternativas à Optimização Sem Derivadas	27
2.4	Classes de algoritmos em Optimização Sem Derivadas	29
2.4.1	Métodos de procura directa	29
2.4.2	Métodos de procura unidireccional	30
2.4.3	Métodos de regiões de confiança	31
2.5	Algumas considerações sobre eficiência	32
3	Métodos de procura directa direccional globalmente convergentes	35
3.1	Conjuntos geradores positivos e bases positivas	35
3.1.1	Definição e propriedades	36
3.1.2	Construção de bases positivas	37
3.2	Algoritmos de procura directa direccional	39
3.2.1	Descrição da classe de algoritmos	40
3.2.2	Hipóteses usadas na análise de convergência global	42
3.2.3	Descrição completa das estratégias de globalização	43
3.2.4	Convergência global num contexto continuamente diferenciável	46
3.2.5	Convergência global num contexto não suave	51
3.3	O método de procura directa com grelha adaptável	54
3.3.1	Uma descrição resumida do algoritmo	55

3.3.2	Análise de convergência global	57
3.3.3	A implementação LTMADS	58
4	Métodos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas globalmente convergentes	61
4.1	Derivadas simplécticas	61
4.1.1	Definição e erro dos gradientes simplécticos	62
4.1.2	Derivadas simplécticas não determinadas	63
4.1.3	Aspectos geométricos do conjunto de amostragem	65
4.2	Algoritmos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas	65
4.2.1	Descrição da classe de algoritmos	66
4.2.2	Análise de convergência global	67
4.2.3	O algoritmo de filtro implícito	70
5	Utilização de gradientes simplécticos em procura directa direcciona	71
5.1	Indicadores de descida simplécticos	71
5.2	Ordenação das direcções de sondagem	73
5.3	Outras utilizações dos indicadores de descida simplécticos	75
5.4	Validação das estratégias propostas no contexto da procura directa direcciona	77
5.5	Poda das direcções de sondagem	80
5.6	Resultados computacionais	83
5.6.1	Discussão baseada nos melhores resultados	85
5.6.2	Discussão baseada na totalidade dos resultados	86
5.6.3	Alguns testes adicionais	92
5.6.4	Poda das direcções de sondagem	94
6	Utilização de gradientes simplécticos em procura directa direcciona não suave	95
6.1	Propriedades dos gradientes simplécticos limite	96
6.1.1	O caso de funções contínuas à Lipschitz	99
6.1.2	O caso de funções estritamente diferenciáveis	101
6.2	Aplicações em métodos de procura directa direcciona	104
6.3	Validação das estratégias propostas no contexto da procura directa direcciona não suave	104
6.3.1	Procura em padrão	105

6.3.2	Procura directa com grelha adaptável	105
6.4	Resultados computacionais	107
7	Dois novos algoritmos para Optimização Sem Derivadas	109
7.1	Decréscimo suficiente e direcções de descida simpléctica	110
7.2	Um método de procura directa direccional curvilínea	112
7.3	Análise de convergência global do método de procura directa direccional curvilínea	113
7.4	Um método híbrido de procura directa e unidireccional	120
7.5	Análise de convergência global do algoritmo híbrido de procura directa e uni- direccional	122
8	Breve introdução aos métodos de procura directa direccional para proble- mas com restrições	127
9	Resolução de dois problemas aplicados	133
9.1	Simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito	133
9.1.1	Uma descrição resumida do problema	133
9.1.2	Resultados computacionais	136
9.2	Calibração de parâmetros estelares	140
9.2.1	Descrição do problema	140
9.2.2	Resultados computacionais preliminares	142
10	Conclusões e questões em aberto	147
10.1	Conclusões	147
10.2	Questões em aberto	149

Lista de Figuras

2.1	Uma função perturbada por ruído numérico.	28
2.2	Minimização de uma função recorrendo a um método de procura em padrão. . . .	33
3.1	A classe dos métodos de procura directa direccional.	41
3.2	Actualização do comprimento do passo de forma a gerar grelhas racionais.	45
3.3	Uma grelha resultante do uso de uma base positiva maximal.	46
3.4	Minimização de uma variante da função de Dennis-Woods por um método de procura directa direccional.	55
3.5	Cálculo, segundo a implementação LTMADS, de uma direcção apenas dependente do comprimento do passo.	59
3.6	Cálculo, de acordo com a implementação LTMADS, dos conjuntos geradores positivos a utilizar no passo de sondagem do algoritmo de procura directa com grelha adaptável.	60
4.1	Exemplos de conjuntos simplécticos de dimensão 1, 2 e 3.	62
4.2	Um método de procura unidireccional baseado em gradientes simplécticos.	68
5.1	A classe dos métodos de procura directa direccional, adaptada para identificar conjuntos em equilíbrio- Λ e utilizar indicadores de descida simplécticos.	74
5.2	Ordenação das direcções de sondagem, de acordo com os ângulos que fazem com o indicador de descida simpléctico.	75
5.3	Ordenação das direcções de sondagem, recorrendo a um indicador de descida simpléctico. O conjunto gerador positivo considerado é $D_k = [I - I]$	75
5.4	Definição de um passo de procura simples, baseado num indicador de descida simpléctico. O ponto a testar é representado pelo círculo azul. O conjunto gerador positivo considerado é $D_k = [I - I]$	76
5.5	Um passo de procura simples, baseado num indicador de descida simpléctico. . . .	76
5.6	Actualização do comprimento do passo exigindo decréscimo suficiente, mas gerando grelhas racionais.	77
7.1	Um método de procura directa direccional curvilínea.	114

7.2	Um método híbrido de procura directa e unidireccional.	121
9.1	Configuração indeformada do sistema mecânico de potencial contacto com atrito. .	134
9.2	Aplicação de um método de procura directa direccional à simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $[I - I]$. O indicador de descida simplético é calculado numa variante sgradiente , guarda-todos	139
9.3	Aplicação de um método de procura directa direccional à simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $[-e I]$. O indicador de descida simplético é calculado numa variante sgradiente , guarda-sucesso	140
9.4	Calibração de parâmetros para a estrela HD37124.	146

Lista de Tabelas

2.1	Comparação entre o número de avaliações da função objectivo num método de procura directa e num algoritmo baseado em regiões de confiança para OSD. . . .	33
3.1	Resumo das iterações resultantes da aplicação de um método de procura directa direcciona, sem limite inferior estritamente positivo para o parâmetro de actualização do comprimento do passo em iterações sem sucesso.	50
5.1	Dimensões da lista X_k e do conjunto Y_k a utilizar no cálculo das derivadas simplécticas.	84
5.2	Conjunto de problemas a testar e resultados para a versão base	85
5.3	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Resultados seleccionados para o caso sgradiente e $D = [I - I]$	86
5.4	Resultados para as melhores versões, utilizando sgradiente na variante guarda-todos e considerando a base positiva $D = [I - I]$	87
5.5	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso sgradiente e $D = [I - I]$	88
5.6	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso shessiana e $D = [I - I]$	89

5.7	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso sgradiente e $D = [-e \ I]$	90
5.8	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso shessiana e $D = [-e \ I]$	91
5.9	Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos e variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão base , em função da dimensão dos problemas. Caso sgradiente , na variante guarda-todos e $D = [I \ -I]$	92
5.10	Percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo, em comparação com a versão base , em função da dimensão dos problemas. Caso sgradiente , na variante guarda-todos e $D = [I \ -I]$	93
6.1	Conjunto de funções não suaves considerado nos testes computacionais.	107
6.2	Resultados computacionais relativos à ordenação das direcções de sondagem, recorrendo a gradientes simplécticos, quando aplicada a um conjunto de problemas não suaves.	108
9.1	Resultados computacionais para as melhores estratégias na simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $D = [I \ -I]$	137
9.2	Resultados computacionais para as melhores estratégias na simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $D = [-e \ I]$	138
9.3	Limites a considerar nos valores das variáveis do problema da calibração de parâmetros estelares.	142
9.4	Resultados computacionais para a calibração de parâmetros estelares.	145

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações gerais

A resolução de um problema de optimização consiste na identificação de um minimizante (ou maximizante) para uma função, possivelmente sujeita a um conjunto de restrições nos valores das variáveis que definem uma região admissível. Os minimizantes procurados podem ser locais ou relativos, quando são apenas válidos numa vizinhança admissível, ou globais ou absolutos, quando válidos em toda a região admissível. A caracterização de minimizantes locais através de condições necessárias e suficientes, de primeira ou segunda ordem, requer o valor das derivadas da função objectivo e, possivelmente, das funções que definem as restrições. Estas conhecidas constatações evidenciam a dificuldade, analítica e numérica, em identificar minimizantes quando as derivadas da função objectivo são desconhecidas ou difíceis de calcular.

Em diversas áreas da Engenharia e das Ciências Físicas ou Computacionais, é frequente as funções a optimizar resultarem de simulações computacionais complexas ou de experiências laboratoriais. Em tais situações, as derivadas da função a optimizar podem não estar disponíveis e não ser passíveis de aproximação numérica, dado o custo associado ao seu cálculo. Desta forma, a *Optimização Sem Derivadas* (OSD) assume um papel relevante no cálculo de minimizantes locais para este tipo de funções. O grande número de aplicações da OSD motivou, desde as décadas de 50 e 60, o desenvolvimento de várias classes de algoritmos adequados a este tipo de optimização. Porém, a análise das propriedades de *convergência global* destes algoritmos, ou seja, da sua capacidade em convergir para um (candidato a) minimizante independentemente do ponto inicial considerado, tem sido objecto de renovado interesse nos últimos dez anos.

Entre as classes de métodos mais utilizados e estudados para OSD encontra-se a Procura Directa e, em particular, a Procura Directa Direcional. Estes algoritmos progridem por *inspecção directa* dos valores da função a optimizar, o que se traduz, obviamente, em

problemas de eficiência, nomeadamente quando as iteradas se aproximam de um ponto estacionário. É desejável que um algoritmo desenvolvido para Optimização Não Linear (com ou sem recurso a derivadas) seja, simultaneamente, eficiente (no sentido de realizar poucos cálculos ou poucas iterações) e robusto (que permita a resolução de uma larga maioria de problemas do tipo em estudo). Os métodos de procura directa são conhecidos pela sua robustez e fácil paralelização, mas, igualmente, pela sua ineficiência. A eficiência é um aspecto particularmente relevante em OSD, onde o custo de cada avaliação da função objectivo é elevado.

1.2 As contribuições desta dissertação

O trabalho de investigação, conducente à redacção desta dissertação, teve como principal objectivo a utilização de derivadas simplécticas (como, por exemplo, os gradientes simplécticos) na definição de estratégias que permitam aumentar a eficiência dos algoritmos de procura directa direcciona e no desenvolvimento de novos algoritmos para OSD.

As derivadas simplécticas, quando calculadas a partir de conjuntos de amostragem com geometria adequada, constituem aproximações das verdadeiras derivadas (no sentido clássico do termo ou enquanto modelos sub-rogados para optimização). Nesta dissertação, propomos a construção de indicadores de descida baseados em derivadas simplécticas, que permitam melhorar a eficiência de um método de procura directa direcciona, por exemplo, ordenando o conjunto de pontos a avaliar pelo algoritmo no seu passo de sondagem. Este procedimento não afecta as propriedades de convergência global desta classe de métodos e não acarreta custos adicionais relativos ao número de cálculos da função objectivo. Este trabalho resultou numa publicação na revista *SIAM Journal on Optimization* (ver Custódio e Vicente [31]).

Os métodos de procura directa direcciona, dada a sua natureza direcciona, são particularmente apropriados para a optimização de funções não suaves. Por outro lado, a natureza dos problemas de OSD, em que as funções a avaliar estão sujeitas a erros e ruído diversos, origina, frequentemente, vários tipos de não suavidade ou não diferenciabilidade. Assim sendo, foi pertinente estender o referido estudo a funções não suaves, analisando a aplicação de derivadas simplécticas em métodos de procura directa direcciona, em particular na determinação de indicadores de descida. O trabalho, relatado em Custódio, Dennis e Vicente [28], foi aceite para publicação na revista *IMA Journal of Numerical Analysis*.

As derivadas simplécticas podem, ainda, ser utilizadas na definição de novas classes de algoritmos para OSD, permitindo, por exemplo, incorporar informação acerca da curvatura da função objectivo. Com esta motivação, desenvolvemos dois novos algoritmos (um método de procura directa direcciona curvilínea e um método híbrido de procura directa e unidirecciona), os quais provámos terem propriedades adequadas de convergência global sob as

hipóteses tradicionalmente consideradas neste tipo de análise. Este trabalho será objecto de uma submissão futura ([29]).

Os estudos numéricos relatados em [28, 31] e descritos nesta dissertação evidenciaram que as estratégias baseadas em derivadas simplécticas permitem aumentar a eficiência dos métodos de procura directa direccional em problemas de teste de optimização. Nesta dissertação descrevemos, também, o resultado da sua utilização em dois problemas aplicados de OSD, um resultante da simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito e outro da estimação de parâmetros estelares. Este estudo, embora não tão conclusivo como os anteriores, corrobora a utilidade das derivadas simplécticas como forma de aumentar a eficiência dos métodos de procura directa direccional.

1.3 Organização da dissertação

O Capítulo 2 desta dissertação consiste numa breve introdução à OSD, salientando as principais dificuldades inerentes a este tipo de optimização e motivando a necessidade de algoritmos específicos para a resolução dos problemas pertencentes a esta classe. Em traços gerais, são descritas as principais classes de métodos adequados a este tipo de optimização.

Duas destas classes, nomeadamente os métodos de procura directa direccional e os métodos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas, são descritas em pormenor nos Capítulos 3 e 4, respectivamente. Em cada um destes capítulos é resumida a análise de convergência global dos algoritmos pertencentes à classe em estudo.

No Capítulo 5 são propostas as estratégias baseadas em derivadas simplécticas, mencionadas anteriormente, para melhorar a eficiência dos métodos de procura directa direccional, tendo em vista a sua aplicação a funções continuamente diferenciáveis. É, ainda, avaliado o desempenho computacional destas estratégias.

A extensão deste trabalho a funções não suaves é abordada no Capítulo 6. Os resultados conhecidos sobre a qualidade dos gradientes simplécticos, enquanto aproximações dos verdadeiros gradientes, no caso continuamente diferenciável, são generalizados a funções não suaves, num contexto de procura directa direccional. Este capítulo é concluído com um estudo computacional.

As derivadas simplécticas são utilizadas, no Capítulo 7, para definir dois novos algoritmos para OSD. A descrição de cada um dos novos algoritmos é acompanhada de uma análise de convergência global.

No Capítulo 9 relatam-se duas aplicações: uma proveniente da Mecânica Computacional e outra da Astrofísica. A resolução destes problemas é feita por aplicação de algoritmos de procura directa direccional, cuja eficiência é melhorada com recurso a estratégias baseadas em derivadas simplécticas. Uma vez que estas aplicações correspondem a problemas de

optimização com restrições, faz-se, no Capítulo 8, uma breve introdução à procura directa direccionada sujeita a restrições.

As principais conclusões deste trabalho são resumidas no Capítulo 10. Mencionam-se, ainda, alguns tópicos para investigação futura e questões em aberto em OSD.

Capítulo 2

Breve introdução à Optimização Sem Derivadas

2.1 A classe de problemas de optimização

Consideremos o problema de Optimização Não Linear sem restrições

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

Os algoritmos de Optimização Não Linear têm por objectivo determinar pontos estacionários de primeira ou de segunda ordem, no sentido de identificar um minimizante local. Nesta dissertação não se estudará algoritmos de optimização global, com os quais se pretende determinar minimizantes globais no caso não convexo. A Optimização Não Linear mais clássica lida com problemas em que os valores para a função e as suas derivadas (pelo menos de primeira ordem) estão disponíveis. Neste caso, é possível desenvolver algoritmos, baseados em técnicas de Newton ou de quasi-Newton, capazes de resolver problemas de grandes dimensões, com centenas de milhares ou milhões de variáveis. A tarefa dificulta-se, porém, quando as derivadas da função não são conhecidas, nem podem ser aproximadas numericamente. Nestas situações, recorre-se a métodos de *Optimização Sem Derivadas* (OSD). A dimensão dos problemas capazes de serem resolvidos em OSD reduz-se drasticamente para dezenas ou centenas de variáveis.

O facto das derivadas não serem conhecidas não significa que a função não seja diferenciável. Embora os algoritmos de optimização propostos para esta classe de problemas não recorram explicitamente a derivadas, é essencial supor a existência de algum tipo de derivadas de primeira ordem para efeitos da respectiva análise de convergência global. Refira-se que as propriedades de convergência global dos algoritmos de Optimização Não Linear, e consequentemente de OSD, dizem respeito à capacidade dos algoritmos de gerarem sucessões de

iteradas a convergir para pontos estacionários, independentemente do ponto inicial considerado.

As funções objectivo dos problemas pertencentes a esta classe resultam tipicamente de experiências laboratoriais ou de simulações computacionais complexas. Nalguns casos pode mesmo tratar-se de funções cujos valores numéricos são desconhecidos e apenas comparáveis. De uma forma geral, são problemas de optimização complexos, que podem envolver simulações numéricas relativas a diferentes disciplinas físicas, pelo que o cálculo de um valor para a função objectivo pode implicar o recurso a códigos computacionais distintos, possivelmente executados de forma sequencial. É frequente, em projectos que se desenvolvem ao longo de dezenas de anos e envolvem vários programadores, não haver acesso, total ou parcial, ao código fonte (estando apenas disponível o ficheiro executável). O cálculo de um valor para a função objectivo pode levar desde vários minutos a algumas horas de tempo de CPU e pode estar sujeito a erros de arredondamento ou outro tipo de ruído. Uma outra particularidade de alguns destes problemas é que a avaliação da função objectivo pode ser mal sucedida, mesmo em pontos pertencentes ao domínio inicialmente estabelecido. A identificação de um destes pontos pode ser tão ou mais dispendiosa do que o cálculo de um valor para a função.

Em suma, diríamos que as funções objectivo dos problemas pertencentes a esta classe apresentam, geralmente, as seguintes características:

- o cálculo dos valores da função é dispendioso;
- as derivadas da função objectivo não podem ser calculadas através de diferenciação automática e é inadequada a sua aproximação numérica;
- os valores calculados para a função estão sujeitos a erro ou a ruído, de natureza diversa.

2.2 Algumas áreas de aplicação

A principal motivação para o desenvolvimento de algoritmos de OSD provém das inúmeras aplicações académicas ou industriais onde surgem problemas pertencentes a esta classe.

Como um primeiro exemplo, podemos referir a optimização de geometrias moleculares, descrita em Alberto, Nogueira, Rocha e Vicente [6]. As propriedades eléctricas e magnéticas dos agregados atómicos são determinadas, em grande parte, pela disposição geométrica dos átomos que os constituem. Por outro lado, a energia do agregado varia com esta mesma disposição geométrica, correspondendo as configurações estáveis aos estados de menor energia. Esta característica justifica o interesse em determinar configurações geométricas que minimizem a energia dos agregados. O cálculo desta energia é feito no contexto da união fraca entre

átomos de elementos metálicos, recorrendo a uma dispendiosa simulação de equações diferenciais com derivadas parciais. O cálculo das derivadas é possível no contexto da aplicação relatada em [6], mas é relativamente dispendioso.

Um segundo exemplo, envolvendo algumas variáveis categóricas (inteiras e não passíveis de aproximação fraccionada), resulta da optimização de sistemas de isolamento térmica, reportada em Abramson [1]. Num sistema de isolamento térmica são utilizados interceptores para minimizar o fluxo de calor entre duas superfícies, uma quente e outra fria. O número de interceptores a colocar, as respectivas temperaturas de arrefecimento, bem como a espessura e a constituição dos isoladores que são colocados entre pares de interceptores consecutivos representam as variáveis do problema (a última das quais constitui uma variável categórica). O objectivo é minimizar a energia necessária para manter as temperaturas dos interceptores de calor, de forma a que uma das superfícies se mantenha convenientemente fria. O problema apresenta restrições lineares e não lineares e ainda limites no valor das variáveis.

Muitos outros exemplos poderiam ser apresentados em áreas tão distintas como a Engenharia Aeroespacial (ver Marsden, Wang, Dennis e Moin [72]), a Nanotecnologia (descrito em Zhao, Meza e Van Hove [96]) ou a Medicina (reportado em Berenbaum [13]). No Capítulo 9 desta dissertação serão resolvidos, com recurso a técnicas de OSD, dois problemas resultantes de aplicações: um proveniente da área da Mecânica Computacional e outro da Astrofísica.

2.3 Alternativas à Optimização Sem Derivadas

Uma estratégia alternativa à utilização de métodos de OSD consiste em estimar os valores das derivadas, com vista à aplicação de algoritmos de Optimização Não Linear baseados em derivadas. Este procedimento pode ser seguido em determinados casos, por aplicação de diferentes técnicas.

Por exemplo, quando o código fonte para o cálculo da função objectivo está disponível, é possível, em princípio, utilizar um pacote de diferenciação automática para produzir um novo código fonte para o cálculo das derivadas. A diferenciação automática recebe um código fonte (o da função) como *input*, para produzir, como *output*, outro código fonte (o das derivadas). O princípio básico da diferenciação automática assenta no facto de que a implementação de uma função, independentemente da sua complexidade, é feita através de uma sequência de operações elementares, que podem ser analisadas sob a regra da função composta para diferenciação (para mais detalhes pode consultar-se Griewank [50]). A diferenciação automática, apesar do seu vasto campo de potencial aplicação, apresenta vários inconvenientes que dificultam a sua utilização. Em primeiro lugar, envolve um esforço considerável de programação e de engenharia de *software*, um investimento que pode não ser exequível. Para além disso, podem ocorrer diversas complicações adicionais quando o código

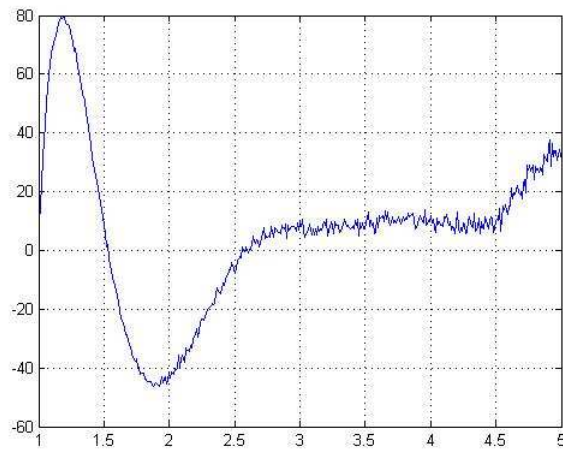


Figura 2.1: Uma função perturbada por ruído numérico.

fonte da função está escrito em diferentes linguagens de programação, o que, por exemplo, é frequente quando a simulação de um determinado processo ou sistema envolve diferentes disciplinas físicas.

As derivadas, e em particular as derivadas parciais, podem ser aproximadas numericamente através de esquemas de diferenciação numérica baseados em diferenças finitas. Em primeiro lugar, coloca-se a questão da existência de diferenciabilidade e de que tipo. Por outro lado, o uso de diferenças finitas pode requerer um número elevado de cálculos da função objectivo, o que pode ser impraticável dado o custo computacional envolvido em cada avaliação. A complexidade da função objectivo traduz-se, com frequência, no cálculo de valores que podem não apresentar o nível de precisão exigida para uma aproximação fiável usando diferenças finitas. Por exemplo, quando se resolvem equações diferenciais, recorrendo a métodos numéricos, existe sempre uma componente de discretização, o que faz com que a função a otimizar esteja sujeita a erros de aproximação, de arredondamento e a outros tipos de ruído. As representações gráficas destas funções podem assemelhar-se à da Figura 2.1. Nestas situações, as pequenas oscilações que surgem com uma elevada frequência dificultam a aproximação das derivadas por técnicas de diferenciação numérica. Aliás, nestes casos, a optimização pode ficar comprometida quando se recorre a um método baseado em derivadas ou suas aproximações.

2.4 Classes de algoritmos em Optimização Sem Derivadas

Os algoritmos de OSD podem ser repartidos em três classes:

- **Métodos de procura directa:** progridem por amostragem da função objectivo em conjuntos de pontos com características geométricas especialmente determinadas.
- **Métodos de procura unidireccional:** em cada iteração, fazem uma procura unidimensional ao longo de uma direcção.
- **Métodos de regiões de confiança:** representam, localmente, a função objectivo recorrendo a modelos, tipicamente quadráticos.

Nesta secção descrevemos, de forma sumária, as principais características dos algoritmos pertencentes a cada uma destas três classes.

2.4.1 Métodos de procura directa

O termo *procura directa*, introduzido pela primeira vez em 1961 por Hooke e Jeeves [54], pretende classificar um algoritmo para OSD que, em cada iteração, compara os valores da função objectivo num conjunto finito de pontos e, em função disso, determina em que novos pontos a função deve ser avaliada. Num método de procura directa não existe nenhuma tentativa, implícita ou explícita, de aproximar o valor das derivadas ou de construir modelos sub-rogados para a função objectivo. Um método de procura directa pode ser aplicável mesmo numa situação em que os valores da função são desconhecidos, desde que seja possível comparar os seus valores em termos de uma relação de ordem total.

A primeira referência a um algoritmo de procura directa respeita a um relatório técnico de Fermi e Metropolis [40], publicado em 1952. No entanto, apesar dos primeiros algoritmos de procura directa terem sido propostos nas décadas de 50 e 60, com, por exemplo, os trabalhos de Box [16] e Spendley, Hext e Himsworth [86], o seu desenvolvimento foi justificado apenas com recurso à intuição geométrica. Este desenvolvimento heurístico motivou, aparentemente, um certo desinteresse da comunidade de optimização numérica por esta área, não obstante o seu uso continuado em aplicações práticas, motivado pelos bons resultados alcançados. É apenas na década de 90, com a tese de doutoramento de Torczon [88] e os trabalhos subsequentes (ver [36, 89, 90]), onde são apresentadas teorias de convergência global para alguns métodos de procura directa, que surge um interesse renovado da comunidade de optimização por esta classe de algoritmos.

Entre os métodos de procura directa destacam-se aqueles em que a amostragem da função objectivo é guiada por conjuntos de direcções com propriedades de descida adequadas, de que

é exemplo a procura em padrão, e os que limitam esta amostragem a vértices de conjuntos de $n + 1$ pontos independentes afim (conjuntos simplécticos). A classe dos métodos de procura directa comporta, assim, duas subclasses: a procura directa direcciona e a procura directa simpléctica.

O algoritmo de OSD mais citado na literatura é um dos métodos de procura directa simpléctica: o algoritmo de Nelder e Mead [79]. Este método baseia-se na ideia inicialmente proposta por Spendley, Hext e Himsworth [86] de construir um ‘padrão evolutivo’ de conjuntos simplécticos. Em cada iteração, é formado um novo conjunto simpléctico por reflexão do anterior, de modo a afastar-se do vértice correspondente ao valor mais elevado da função objectivo. No caso em que o vértice reflectido é ainda o pior vértice, então repete-se a reflexão, agora numa tentativa de melhorar o segundo pior vértice do conjunto simpléctico. São ainda permitidas contracções do conjunto simpléctico na direcção do vértice com o menor valor da função, quando as operações de reflexão identificam a vizinhança de um minimizante local. Qualquer uma destas operações preserva os ângulos do conjunto simpléctico, pelo que a sua ‘forma’ nunca é alterada no decurso do algoritmo. A contribuição de Nelder e Mead [79] consistiu em melhorar a procura, ao permitir deformações da forma dos conjuntos simplécticos para que esta se adapte à curvatura da função objectivo.

Nos métodos de procura directa direcciona incluem-se os métodos de procura em padrão, que analisaremos em detalhe no Capítulo 3. Incluem-se, ainda, algoritmos que adaptam, em cada iteração, o conjunto de direcções de procura à função. Como exemplos, podemos referir o algoritmo de Rosenbrock [85] e mais recentemente os de Coope e Price [27] e de Frimannslund e Steihaug [45]. Neste tipo de algoritmos, o conjunto de direcções que definem o conjunto de amostragem sofre uma rotação em cada iteração por forma a incorporar a informação adquirida acerca da função objectivo nas iterações anteriores.

Em suma, um algoritmo de procura directa não utiliza qualquer forma implícita ou explícita de derivadas da função objectivo, nem considera qualquer tipo de modelo para a sua representação. A optimização recorre apenas à comparação de valores da função objectivo em conjuntos de pontos adequados. Uma revisão mais completa desta classe de métodos encontra-se nos trabalhos de Wright [94], de Lewis, Torczon e Trosset [67], ou de Kolda, Lewis, e Torczon [58] e, mais recentemente, no livro de Conn, Scheinberg e Vicente [24].

2.4.2 Métodos de procura unidirecciona

Os algoritmos pertencentes a esta classe simulam o comportamento dos métodos clássicos de procura unidirecciona baseados em derivadas. O facto da informação sobre o gradiente não estar disponível introduz algumas dificuldades adicionais:

- à partida, não é possível calcular direcções de descida, nem avaliar a qualidade de uma

direcção enquanto direcção de descida;

- condições de decréscimo suficiente, para garantir comprimentos de passo adequados, podem não ser bem sucedidas.

Uma das estratégias adoptadas para superar a primeira dificuldade consiste em explorar, numa dada iteração, um conjunto de direcções, em detrimento de uma única direcção. As direcções consideradas devem, em princípio, gerar $\mathbb{R}^n$ linearmente. No caso do método proposto por Powell [81], as $n + 1$ direcções são calculadas de forma a serem também *conjugadas* entre si. Em cada passo deste método são feitas $n + 1$ procuras unidireccionais, as primeiras n num conjunto de direcções linearmente independentes. A última procura unidireccional é feita usando a direcção definida pelo ponto resultante das n primeiras procuras e o ponto considerado no início do passo. No fim do passo, uma das n direcções linearmente independentes é substituída por esta última direcção.

Grippo, Lampariello e Lucidi [51] consideraram conjuntos de direcções linearmente independentes e os seus simétricos, à semelhança do uso das bases positivas nos métodos de procura directa direccional que descreveremos em pormenor no Capítulo 3. Estes autores utilizam condições de decréscimo suficiente somente baseadas nos valores da função objectivo.

A introdução, num contexto de procura directa, de uma condição de decréscimo suficiente foi primeiro proposta por Yu [95], em 1979. Esta ideia foi posteriormente generalizada por De Leone, Gaudio e Grippo [33] aos métodos de procura unidireccional em OSD e usada nos trabalhos de Grippo, Lampariello e Lucidi [51], Lucidi e Sciandrone [69] e García-Palomares e Rodríguez [46]. Uma condição de decréscimo suficiente foi também utilizada por Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan [37] num algoritmo de procura unidireccional para OSD, considerando uma estratégia de procura não monótona.

Na classe dos métodos de procura unidireccional para OSD incluem-se, ainda, o algoritmo de filtro implícito, proposto originalmente por Kelley *et al.* [15, 93] num contexto de optimização de funções sujeitas a ruído. A optimização é feita com recurso à procura unidireccional, usando um gradiente simpléctico como direcção de pesquisa. A terminologia *filtro implícito* representa a capacidade que este método tem de ‘filtrar’ o ruído numérico presente nas funções, devido à forma como são construídos os gradientes simplécticos. No Capítulo 4 será feito um estudo aprofundado do enquadramento algorítmico proposto para este método por Conn, Scheinberg e Vicente [24].

2.4.3 Métodos de regiões de confiança

A ideia subjacente a esta classe de métodos consiste na aproximação da função objectivo, para efeitos de minimização, por um modelo válido dentro de uma dada região de interesse. Este modelo é progressivamente enriquecido e actualizado sempre que a função objectivo

é calculada num novo ponto. Existem várias técnicas para construir modelos, de entre as quais se destacam a interpolação e regressão polinomiais multivariadas.

Entre os métodos de regiões de confiança para OSD, os algoritmos que apresentam propriedades de convergência global são, justamente, os baseados em interpolação e regressão polinomiais, de que são pioneiros os trabalhos de Winfield [92], de Powell [82] e de Conn e Toint [21]. No entanto, foi o trabalho de Conn, Scheinberg e Toint [22] que formalizou e sistematizou esta classe de algoritmos. Recentemente, Conn, Scheinberg e Vicente [25] apresentaram resultados de convergência de segunda ordem para esta classe de métodos.

Os valores disponíveis para a função objectivo são usados para calcular um polinómio interpolador (linear ou quadrático), que pode ser um modelo de regressão (quando o número de pontos é superior ao número de termos do polinómio) ou um modelo subdeterminado (quando o cenário oposto ocorre). Este modelo polinomial supõe-se ‘válido’ numa vizinhança da iterada corrente, entendida como uma região de confiança (ver Conn, Gould e Toint [20]). O modelo é convenientemente actualizado em função da informação que vai sendo adquirida acerca da função objectivo. O algoritmo de região de confiança toma como nova iterada a solução da minimização do modelo polinomial na região de confiança.

Autores diferentes utilizam bases polinomiais distintas na construção dos modelos. Powell [82] utiliza polinómios de Lagrange, enquanto que Conn e Toint [21] preferem o uso de polinómios de Newton. Uma componente essencial a ambos os algoritmos passa pelo controlo da geometria dos conjuntos de pontos que são usados na construção dos modelos. Esta geometria deve ser adequada, no sentido em que o problema de interpolação não deve estar mal-definido. Conn, Scheinberg e Vicente [26] introduziram a noção de equilíbrio- Λ (com $\Lambda > 0$) para medir a qualidade dos conjuntos de amostragem, propondo ainda algoritmos para construir ou manter conjuntos de pontos com este tipo de equilíbrio.

2.5 Algumas considerações sobre eficiência

Os métodos de procura directa são fáceis de implementar e de paralelizar e, além disso, apresentam alguma flexibilidade na forma como se podem adaptar a diferentes situações e formulações. Contudo, são métodos relativamente lentos. O valor da função objectivo decresce muito rapidamente nas primeiras iterações do algoritmo, mas a convergência é muito lenta. As curvas que representam a evolução do valor da função objectivo em função do número de avaliações exibem, tipicamente, um formato em L, de que é exemplo a curva representada na Figura 2.2. Este comportamento numérico é típico de outros métodos para OSD, sendo mais atenuado nos métodos que exploram informação acerca da curvatura da função (como é o caso dos métodos de regiões de confiança).

Comparativamente com um algoritmo de OSD baseado em regiões de confiança, o qual

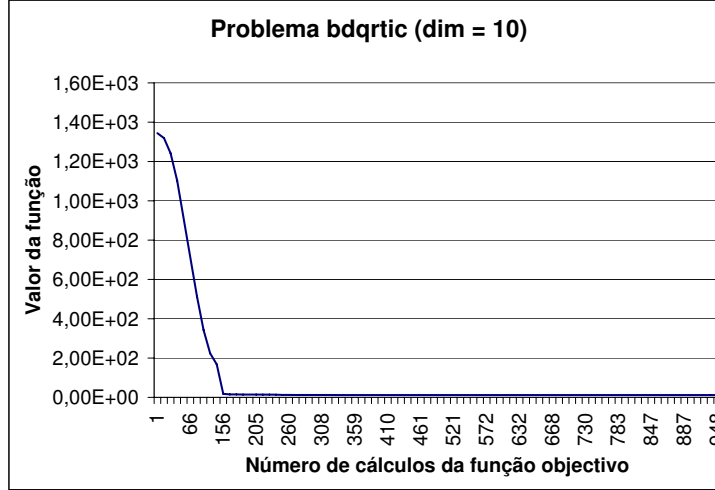


Figura 2.2: Minimização de uma função recorrendo a um método de procura em padrão.

problema	dimensão	Procura Directa	Regiões de Confiança
bdqrtic	20	4120	7426
integreq	20	4244	1389
penalty2	10	496275	1418
srosenbr	20	649621	25011
tridia	20	6635	2071
vardim	10	86316	2626

Tabela 2.1: Comparação entre o número de avaliações da função objectivo num método de procura directa e num algoritmo baseado em regiões de confiança para OSD.

aproxima localmente a função objectivo recorrendo a modelos polinomiais (suaves), os métodos de procura directa não exploram a curvatura da função de forma adequada, o que se traduz num número de cálculos excessivo, como ilustram os resultados presentes na Tabela 2.1. No entanto, os algoritmos de procura directa, e em particular a procura directa direccionada, apresentam características que os tornam atraentes em Optimização Não Suave.

A já referida ineficiência traduz-se, ainda, na dificuldade da utilização dos métodos de procura directa na resolução de problemas de OSD com dimensão elevada. Uma possibilidade consiste em explorar a estrutura do problema, como sugerem Price e Toint [83], à semelhança do que é feito no caso dos métodos de regiões de confiança para OSD (ver Colson e Toint [19]). Contudo, o que viabiliza o uso de métodos de procura directa em problemas de OSD de grande dimensão (ou seja, com um número de variáveis na ordem das centenas) é o facto de

alguns dos algoritmos desta classe serem facilmente paralelizáveis. Entre estes, destacam-se a procura em padrão paralela não sincronizada, proposta em Hough, Kolda e Torczon [56] e a procura multidireccional, proposta em Dennis e Torczon [36].

A análise das taxas de convergência local dos algoritmos é menos adequada no contexto da OSD. Em muitos dos casos, os utilizadores ficam satisfeitos com simples melhorias do valor previamente conhecido para o problema. Frequentemente, o objectivo é apenas obter alguns dígitos correctos, dada a imprecisão dos valores calculados para a função ou tendo em vista a aplicação prática dos resultados. Ainda assim, e no âmbito da procura em padrão, foi realizado um estudo sobre a convergência local desta classe de algoritmos, concluindo-se que, na melhor das hipóteses, a taxa de convergência local será r -linear (ver Dolan, Lewis e Torczon [38]).

Capítulo 3

Métodos de procura directa direccional globalmente convergentes

Conforme o que foi descrito na Subsecção 2.4.1, um algoritmo de procura directa direccional progride por amostragem do valor da função objectivo em conjuntos de pontos com propriedades adequadas. Tal significa que, independentemente do conhecimento do gradiente na iterada corrente do algoritmo, o conjunto de pontos considerado deverá definir uma direcção de descida (ou seja, uma direcção que forme um ângulo inferior a 90° com o vector simétrico do gradiente). Como veremos na Secção 3.1, uma forma de satisfazer esta condição consiste em definir os conjuntos de amostragem recorrendo a conjuntos geradores positivos ou a bases positivas.

Estes conjuntos geradores positivos são uma componente essencial no delineamento dos algoritmos de procura directa direccional descritos na Secção 3.2. Apesar das interessantes propriedades de convergência, esta classe de algoritmos apresenta algumas limitações práticas, resultantes de explorar um número finito de direcções (os vectores pertencentes aos conjuntos geradores positivos considerados). Foi esta a principal motivação que conduziu ao desenvolvimento do método de procura directa com grelha adaptável, que será descrito na Secção 3.3.

3.1 Conjuntos geradores positivos e bases positivas

A teoria da dependência linear positiva foi estabelecida por Davis [32]. Contudo, o uso de conjuntos geradores positivos em procura directa apenas surge com o trabalho de Yu [95]. Torczon [90] estabeleceu a primeira análise de convergência global de um método de procura em padrão. No entanto, o conjunto de direcções consideradas pelo algoritmo consistia nas *direcções coordenadas*, $\{e_1, \dots, e_n, -e_1, \dots, -e_n\}$, onde e_i representa a i -ésima coluna da matriz identidade. Foi mais tarde, no decurso da análise do trabalho de Yu [95], que Lewis e

Torczon [63] se aperceberam da utilidade que as bases positivas têm na procura em padrão, ao permitirem generalizar o conjunto de direcções consideradas pelos algoritmos desta classe.

3.1.1 Definição e propriedades

O conjunto gerado positivamente pelos vectores $d_1, \dots, d_r$ de $\mathbb{R}^n$ é o cone convexo

$$\{d \in \mathbb{R}^n : d = \alpha_1 d_1 + \dots + \alpha_r d_r, \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, r\}.$$

Em rigor, dever-se-ia ter designado este conjunto como o conjunto gerado não negativamente pelos vectores $d_1, \dots, d_r$. No entanto, optámos por manter a terminologia adoptada em Davis [32] e seguida por Lewis e Torczon [63]. Um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$ é um conjunto de vectores que gera positivamente $\mathbb{R}^n$. No que se segue, $r \in \mathbb{N}$ assume os valores permitidos pelo contexto.

Um conjunto de vectores $\{d_1, \dots, d_r\}$ diz-se positivamente dependente se pelo menos um dos d_i pertencer ao conjunto gerado positivamente pelos restantes vectores $\{d_1, \dots, d_r\} \setminus \{d_i\}$, ou seja, se pelo menos um dos vectores puder escrever-se como combinação linear positiva (entenda-se não negativa) dos restantes vectores do conjunto. Caso contrário, o conjunto dir-se-á positivamente independente.

Proposição 3.1.1. (Davis [32]) *Seja $\{d_1, \dots, d_r\}$ um conjunto de vectores não nulos que gera linearmente $\mathbb{R}^n$. As propriedades seguintes são equivalentes:*

1. $\{d_1, \dots, d_r\}$ gera positivamente $\mathbb{R}^n$.
2. $-d_i$ pertence ao conjunto gerado positivamente pelos restantes vectores, para todo o $i \in \{1, \dots, r\}$.
3. Existem escalares reais estritamente positivos, $\alpha_1, \dots, \alpha_r$, tais que

$$\alpha_1 d_1 + \dots + \alpha_r d_r = 0.$$

Da equivalência entre (1) e (2) na Proposição 3.1.1 facilmente se deduz o corolário seguinte, que permite concluir que a cardinalidade mínima de um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$ é $n + 1$.

Corolário 3.1.1. *Se $\{d_1, \dots, d_r\}$ gera positivamente $\mathbb{R}^n$, então um qualquer seu subconjunto com $r - 1$ elementos gera linearmente $\mathbb{R}^n$.*

Um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$, positivamente independente, diz-se uma base positiva para $\mathbb{R}^n$. De forma equivalente, uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ é um conjunto de

vectores que gera positivamente $\mathbb{R}^n$ e tal que nenhum seu subconjunto próprio apresenta a mesma propriedade (ver Davis [32]).

Uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ com cardinalidade $n + 1$ diz-se uma base positiva minimal. O número máximo de elementos de uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ é $2n$ (ver Davis [32]), designando-se esta base por maximal.

O próximo teorema (novamente, ver Davis [32]) estabelece a propriedade que justifica a utilização de conjuntos geradores positivos e de bases positivas como direcções de amostragem em métodos de procura directa direcciona.

Proposição 3.1.2. *O conjunto $\{d_1, \dots, d_r\}$ gera positivamente $\mathbb{R}^n$ se e só se para qualquer vector $v \neq 0$ em $\mathbb{R}^n$ é possível encontrar $i \in \{1, \dots, r\}$ tal que $v^\top d_i > 0$.*

Em termos práticos, se tivermos uma função continuamente diferenciável numa vizinhança de um ponto x , a Proposição 3.1.2 garante que, se explorarmos os vectores pertencentes a um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$, encontraremos um vector d_i pertencente ao conjunto tal que $-\nabla f(x)^\top d_i > 0$. Isto significa que, quando $\nabla f(x) \neq 0$, todo o conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$ apresenta pelo menos uma direcção de descida.

3.1.2 Construção de bases positivas

A Proposição 3.1.2 permite-nos justificar que as colunas de $[I \ -I]$ e $[-e \ I]$ constituem exemplos de conjuntos geradores positivos para $\mathbb{R}^n$. Nesta notação, I representa a matriz identidade de ordem n e e o vector $[1 \dots 1]^\top$. Se retirarmos um vector a $[I \ -I]$ ou a $[-e \ I]$ deixamos de ter um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$ (igualmente comprovado pela Proposição 3.1.2). Desta forma, $[I \ -I]$ e $[-e \ I]$ são exemplos, respectivamente, de uma base positiva maximal e minimal para $\mathbb{R}^n$.

No que se segue é conveniente supor que $[d_1 \dots d_r]$ representa, não só a matriz com r colunas $d_1, \dots, d_r$, mas, também, o conjunto dos r vectores $\{d_1, \dots, d_r\}$, de acordo com o contexto. O resultado seguinte, estabelecido em Lewis e Torczon [63], sugere um procedimento simples para gerar bases positivas.

Proposição 3.1.3. *Seja $[d_1 \dots d_r]$ uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ e consideremos uma matriz não singular $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Então $C[d_1 \dots d_r]$ é, também, uma base positiva para $\mathbb{R}^n$.*

A aplicação deste resultado às bases positivas $[I \ -I]$ e $[-e \ I]$ permite-nos estabelecer um corolário conhecido, apresentado a seguir.

Corolário 3.1.2. *Seja $C = [c_1 \dots c_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz não singular. Então $[C \ -C]$ e $[-\sum_{j=1}^n c_j \ C]$ são bases positivas para $\mathbb{R}^n$.*

Mais geralmente, dada uma base linear para $\mathbb{R}^n$ é sempre possível gerar uma base positiva com r elementos, em que $n + 1 \leq r \leq 2n$.

Proposição 3.1.4. *Seja $C = [c_1 \cdots c_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz não singular. Consideremos $n + 1 \leq r \leq 2n$ e seja J um subconjunto dos índices das colunas de C com $2n - r + 1$ elementos. Então o conjunto*

$$D = \{c_1, \dots, c_n\} \cup \left\{ -\sum_{j \in J} c_j \right\} \cup \{-c_j : j \in \{1, \dots, n\} \setminus J\}$$

é uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ com r elementos, incluindo as colunas de C .

Demonstração. É evidente que todas as colunas da matriz C figuram entre os r elementos do conjunto D . Recorrendo à Proposição 3.1.1, para garantir que D gera positivamente $\mathbb{R}^n$, basta-nos mostrar que $-d$ pertence ao conjunto gerado positivamente pelos restantes elementos de D , para cada vector $d \in D$.

Se $d = \pm c_i$, com $i \notin J$ ou $d = -\sum_{j \in J} c_j$ então o resultado é imediato. Suponhamos que $d = c_i$, com $i \in J$. Então

$$-d = -c_i = -\sum_{j \in J} c_j + \sum_{j \in J; j \neq i} c_j$$

é uma combinação linear positiva dos restantes vectores de D .

Suponhamos, agora, que um dos vectores, designado por d , do conjunto gerador positivo D se pode escrever como combinação linear positiva dos restantes elementos de D e mostremos que chegamos a uma contradição. Nas igualdades seguintes $\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}, \beta_1, \dots, \beta_n$ supõem-se coeficientes não negativos.

Consideremos $d = c_i$, com $i \notin J$, escrito como combinação linear positiva dos restantes elementos de D ,

$$d = c_i = \sum_{j=1; j \neq i}^n \alpha_j c_j + \alpha_{n+1} \left(-\sum_{j \in J} c_j \right) + \sum_{j \notin J} \beta_j (-c_j).$$

Agrupando os coeficientes correspondentes a cada vector c_j vem que

$$\sum_{j \in J} (\alpha_j - \alpha_{n+1}) c_j + \sum_{j \notin J; j \neq i} (\alpha_j - \beta_j) c_j - (\beta_i + 1) c_i = 0.$$

Como $\{c_1, \dots, c_n\}$ é um conjunto linearmente independente, uma vez que a matriz C é não singular, temos que $\beta_i = -1$, o que é uma contradição.

Analogamente, se $d = c_i$, com $i \in J$, se $d = -c_i$, com $i \notin J$ ou $d = -\sum_{j \in J} c_j$, então o vector d figuraria em ambos os membros da equação que traduz a combinação linear positiva,

num dos membros com um coeficiente igual a 1. Como $\{c_1, \dots, c_n\}$ é uma base para $\mathbb{R}^n$, tal implicaria que pelo menos um dos coeficientes da combinação linear positiva seria -1 , o que é uma contradição. Conclui-se, assim, que D é uma base positiva para $\mathbb{R}^n$. $\square$

Alberto, Nogueira, Rocha e Vicente [6] propuseram a construção de bases positivas minimais com ângulos de igual amplitude entre os vectores que as constituem.

Consideremos uma base positiva para $\mathbb{R}^n$ com $n + 1$ elementos, $\{b_1, \dots, b_{n+1}\}$. Se supusermos que os $n + 1$ vectores estão normalizados e representarmos por α o ângulo entre dois vectores distintos, a condição da existência de ângulos uniformes traduz-se por

$$a = \cos(\alpha) = b_i^\top b_j, \forall i, j \in \{1, \dots, n + 1\}, i \neq j,$$

onde $a \neq 1$. Considerando $b_{n+1} = \sum_{i=1}^n \lambda_i b_i$, onde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são escalares reais prova-se que $a = -\frac{1}{n}$.

Logo, para construir a base positiva pretendida, basta-nos determinar os vectores $b_1, \dots, b_n$, ou seja, determinar uma matriz $B = [b_1 \cdots b_n]$ tal que $B^\top B = A$ com

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1 & \cdots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

A matriz A é definida positiva porque é uma matriz real simétrica, estritamente diagonalmente dominante e com entradas diagonais positivas. Desta forma, para determinar B podemos recorrer à decomposição de Cholesky $A = LL^\top$, onde L é uma matriz não singular, triangular inferior e com elementos diagonais positivos. A matriz B será a transposta da matriz L .

3.2 Algoritmos de procura directa direcciona

De acordo com o que foi dito na Subsecção 2.4.1, embora os algoritmos de procura directa direcciona sejam usados sem suporte teórico desde a década de 50, foi apenas no final dos anos 90, com a tese de doutoramento de Torczon [88] e os trabalhos subsequentes [36, 89, 90], que foi feita uma formalização para alguns dos algoritmos pertencentes a esta classe, nomeadamente para os métodos de procura em padrão. Torczon [90] apresentou uma primeira análise de convergência global para a classe dos métodos de procura em padrão, supondo que a função objectivo é continuamente diferenciável, o que pode revelar-se uma hipótese demasiado exigente em OSD. Com esta motivação, Audet e Dennis [9] generalizaram, em 2002,

esta classe de algoritmos, analisando a sua convergência num contexto não suave.

3.2.1 Descrição da classe de algoritmos

A descrição que faremos da classe dos métodos de procura directa direccional segue a estrutura proposta por Audet e Dennis [9], no contexto da procura em padrão generalizada. Focaremos o caso sem restrições

$$\min f(x), \text{ onde } f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}.$$

Uma breve abordagem ao caso com restrições será feita no Capítulo 8. A impossibilidade de se calcular o valor da função objectivo nalguns pontos pertencentes ao respectivo domínio, descrita na Secção 2.1, traduz-se na possibilidade da função assumir o valor $+\infty$.

Um algoritmo de procura directa direccional gera uma sucessão de iteradas $\{x_k\}$ em $\mathbb{R}^n$, cuja correspondente sucessão dos valores da função objectivo $\{f(x_k)\}$ é não crescente. Dado o ponto x_k , o processo de encontrar uma nova iterada x_{k+1} divide-se em duas fases: um *passo de procura* e um *passo de sondagem*.

O passo de procura é opcional e extremamente flexível, não intervindo de forma activa na análise de convergência global. A escolha dos pontos a avaliar é isenta de regras, podendo ser incorporadas quaisquer estratégias de procura com o objectivo de reduzir o valor corrente da função objectivo. Algumas possibilidades compreendem o recurso a heurísticas (ver Vaz e Vicente [91]) ou a optimização sub-rogada da função objectivo (ver Booker *et al.* [14]). O único requisito que o passo de procura tem de satisfazer é ser um procedimento finito. No entanto, podem ter de ser impostas algumas condições adicionais, dependendo da estratégia de globalização considerada, conforme será descrito na Subsecção 3.2.3.

O segundo passo, o passo de sondagem, segue regras mais rígidas, uma vez que irá garantir a convergência global do algoritmo. Este passo só é executado se o passo de procura não conseguiu melhorar o valor da função objectivo. Neste caso é considerada uma ‘vizinhança’ da iterada corrente, $V_k = V(x_k)$, definida recorrendo a um conjunto de vectores que constituem um conjunto gerador positivo, D_k , para $\mathbb{R}^n$

$$V_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}. \quad (3.1)$$

O parâmetro α_k representa o comprimento do passo e é actualizado em cada iteração. O passo de sondagem consiste numa pesquisa local, em torno da iterada corrente, testando os pontos da vizinhança descrita em (3.1), até que todos os pontos tenham sido avaliados ou até que se encontre um ponto que permita melhorar o valor da função objectivo. Os vectores pertencentes a D_k designam-se por direcções de sondagem.

Algoritmo de Procura Directa Direccional

Inicialização

Escolher $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x_0) < +\infty$ e $\alpha_0, \xi_{min}, \xi_{max}$ e ξ_0 tais que $\alpha_0 > 0, 0 < \xi_{min} \leq \xi_{max} < 1$ e $\xi_0 \in [\xi_{min}, \xi_{max}]$. Fazer $k = 0$.

Passo de Procura

Avaliar a função apenas num número finito de pontos, com o objectivo de identificar um ponto x que satisfaça $f(x) < f(x_k)$. Se foi possível encontrar um ponto nas condições referidas, então $x_{k+1} = x$, a iteração é declarada como um sucesso e o passo de sondagem não é executado.

Passo de Sondagem

Escolher um conjunto gerador positivo D_k para $\mathbb{R}^n$ e avaliar a função objectivo no conjunto de sondagem $V_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}$. Logo que se encontre um ponto de sondagem $x_k + \alpha_k d_k \in V_k$ tal que $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$, parar a sondagem, considerar $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e declarar a iteração como bem sucedida. Caso contrário, declarar a iteração como um insucesso e considerar $x_{k+1} = x_k$.

Actualização do comprimento do passo

Se a iteração foi mal sucedida então $\alpha_{k+1} = \xi_k \alpha_k$, reduzindo-se o comprimento do passo. Caso contrário, manter ou aumentar o comprimento do passo. Escolher um novo factor, ξ_{k+1} , para a redução do comprimento do passo tal que $\xi_{k+1} \in [\xi_{min}, \xi_{max}]$. Incrementar k em uma unidade e regressar ao passo de procura.

Figura 3.1: A classe dos métodos de procura directa direccional.

No caso continuamente diferenciável, o objectivo do passo de sondagem é, de acordo com a Proposição 3.1.2 e desde que x_k não seja um ponto estacionário, garantir um decréscimo do valor da função objectivo para comprimentos de passo suficientemente pequenos. O passo de procura possibilita uma pesquisa mais abrangente, o que influencia a qualidade do ponto estacionário determinado pelo algoritmo.

Se em ambos os passos não foi possível melhorar o valor da função objectivo, então a iteração é declarada como um insucesso e o comprimento do passo é necessariamente reduzido. Caso contrário, significa que foi possível calcular um valor mais baixo para a função, o ponto correspondente é aceite como a nova iterada (x_{k+1}), a iteração é declarada com bem sucedida e o comprimento do passo pode ser aumentado ou mantido. A Figura 3.1 apresenta uma descrição esquemática de um algoritmo de procura directa direccional.

A descrição deste algoritmo, bem como a dos restantes algoritmos incluídos nesta dissertação, é feita sem a inclusão de um critério de paragem. Desta forma geram-se sucessões de iteradas cuja convergência para um ponto estacionário pode ser analisada. Na prática,

podem ser implementadas diferentes condições que determinam o fim da execução de um código baseado nestes algoritmos. Por exemplo, pode impor-se um número máximo de avaliações para a função objectivo ou um número máximo de iterações, embora um critério de paragem natural consista no valor do comprimento do passo atingir um determinado valor mínimo.

Na estrutura proposta para os algoritmos pertencentes à procura directa direccionada, o passo de sondagem segue uma estratégia oportunista. Logo que o algoritmo identifique um ponto que reduz o valor da função objectivo, esse ponto é aceite como a nova iterada corrente e as restantes direcções de sondagem não são exploradas. Algumas instâncias de algoritmos pertencentes a esta classe utilizam passos de sondagem completos, em que todas as direcções de sondagem são obrigatoriamente testadas. Conforme veremos na Subsecção 3.2.4, esta última estratégia, ao ser mais exigente, permite fortalecer os resultados de convergência global que se provam para alguns dos métodos de procura directa direccionada.

3.2.2 Hipóteses usadas na análise de convergência global

Tradicionalmente, a análise de convergência global dos métodos de procura directa direccionada supõe que todas as iteradas geradas pelo algoritmo pertencem a um conjunto compacto. Uma vez que a sucessão dos valores da função correspondentes às iteradas geradas pelo algoritmo, $\{f(x_k)\}$, é não crescente, tal é garantido supondo que o conjunto

$$L(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\} \quad (3.2)$$

é compacto. No entanto, alguns dos resultados que iremos mostrar apenas requerem que f seja limitada inferiormente. Consideremos, então, as hipóteses seguintes, a que recorreremos sempre que necessário.

Hipótese 3.2.1. *A função f é limitada inferiormente em $L(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$.*

Hipótese 3.2.2. *O conjunto $L(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ é compacto.*

A análise de convergência global que apresentamos é baseada nos trabalhos de Torczon [90], Audet e Dennis [9] e Kolda, Lewis e Torczon [58]. Referimos, novamente, que por convergência global entende-se a convergência para um ponto estacionário, independentemente do ponto inicial considerado pelo algoritmo. A análise de convergência global dos métodos de procura directa direccionada divide-se em duas partes. Em primeiro lugar, é necessário garantir a existência de pelo menos uma subsucessão de comprimentos do passo $\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ a satisfazer $\lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k = 0$. A segunda parte da análise de convergência global consiste em relacionar uma medida de estacionariedade (por exemplo, no caso continuamente

diferenciável, a norma do gradiente) com o comprimento do passo. Desta forma, garante-se a convergência de subsucessões de pontos gerados pelo algoritmo para pontos estacionários.

3.2.3 Descrição completa das estratégias de globalização

À semelhança do que acontece nos métodos de optimização baseados em derivadas, a utilização de uma direcção de descida (garantida na procura directa direccionada pelo uso de conjuntos geradores positivos na definição das direcções de sondagem) não é suficiente para garantir a convergência de um algoritmo. Há que impor comprimentos de passo adequados relativamente ao decréscimo que é produzido no valor da função. De uma forma geral, existem dois tipos de estratégias para globalizar os algoritmos de procura directa direccionada: uma baseada na exigência de um *decrécimo suficiente* do valor da função objectivo em iteradas com sucesso e outra baseada no uso de *grellhas racionais* a que devem pertencer os pontos testados pelo algoritmo.

Decréscimo suficiente

No algoritmo descrito na Figura 3.1, um novo ponto x é aceite em substituição da iterada corrente, x_k , desde que $f(x) < f(x_k)$. Ou seja, apenas é exigido um decréscimo simples do valor da função objectivo. Suponhamos que esta condição é substituída por outra em que se exige um decréscimo suficiente do valor da função objectivo, quando comparado com uma função do comprimento do passo considerado:

$$f(x) < f(x_k) - \rho(\alpha_k). \quad (3.3)$$

A função $\rho(\cdot)$ é, tipicamente, contínua e não decrescente, definida por $\rho : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$, e satisfaz

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\rho(t)}{t} = 0.$$

Um exemplo simples deste tipo de função é dado por $\rho(\alpha) = c\alpha^p$, com $c > 0$ e $p > 1$.

O Teorema 3.2.1 estabelece a existência de uma subsucessão de comprimentos do passo a convergir para zero, apenas exigindo que a função objectivo seja limitada inferiormente. Optámos por incluir esta demonstração para tornar auto-contida a análise de convergência global apresentada no Capítulo 7.

Teorema 3.2.1. *Sob a Hipótese 3.2.1, um método de procura directa direccionada que utiliza a condição (3.3) para exigir decréscimo suficiente nas iterações com sucesso gera comprimentos de passo tais que*

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0.$$

Demonstração. Com o objectivo de chegar a uma contradição, suponhamos que

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k \neq 0.$$

Então existe $\alpha_* > 0$ tal que $\alpha_k > \alpha_*$, qualquer que seja k . Uma vez que em cada iteração sem sucesso o factor para a actualização do comprimento do passo satisfaz $\xi_k \leq \xi_{max} < 1$, o número de iterações bem sucedidas é, obrigatoriamente, infinito. Como $\rho(\cdot)$ é uma função não decrescente, que satisfaz a propriedade adicional $\rho(t) > 0$ para $t > 0$, existe $\rho_* > 0$ tal que $\rho(\alpha_k) \geq \rho(\alpha_*) = \rho_*$, qualquer que seja k . Assim, em cada iteração com sucesso

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) < -\rho(\alpha_k) \leq -\rho_* < 0.$$

Atendendo a que nas iterações sem sucesso $f(x_{k+1}) - f(x_k) = 0$ podemos concluir que $f(x_k) \rightarrow -\infty$, o que contradiz a Hipótese 3.2.1. $\square$

Para estabelecer o Teorema 3.2.1 foi fundamental a existência do limite superior, ξ_{max} , para o factor de actualização do comprimento do passo em iterações mal sucedidas. O exemplo seguinte, retirado de Kolda, Lewis e Torczon [58], ilustra uma situação em que não é imposto o referido limite e, como consequência, não existe nenhuma subsucessão de comprimentos do passo a convergir para zero.

Considere-se $x_0 = x_* \in \arg \min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$, pelo que toda a iteração de um algoritmo de procura directa direccionada será mal sucedida. Consideremos $\alpha_0 = 1$ e seja $\xi_k = \frac{k+3}{k+2} \frac{k+1}{k+2} = \frac{k^2+4k+3}{k^2+4k+4} \in [\frac{3}{4}, 1)$. Em qualquer iteração sem sucesso tem-se que $\alpha_{k+1} = \xi_k \alpha_k$. Logo, como todas as iterações são mal sucedidas, $\alpha_{k+1} = \left(\prod_{i=0}^k \xi_i\right) \alpha_0$. Mas,

$$\prod_{i=0}^k \xi_i = \left(\frac{k+3}{k+2} \frac{k+1}{k+2}\right) \left(\frac{k+2}{k+1} \frac{k}{k+1}\right) \cdots \left(\frac{4}{3} \frac{2}{3}\right) \left(\frac{3}{2} \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \frac{k+3}{k+2}.$$

Logo, $\lim_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = \frac{1}{2} \neq 0$.

Grelhas racionais

Uma estratégia de globalização alternativa à imposição de decréscimo suficiente consiste na utilização de grelhas inteiras ou racionais. Os métodos de procura directa direccionada que usam este novo tipo de estratégia de globalização são geralmente designados por métodos de procura em padrão. Os resultados de convergência global para esta estratégia supõem as condições enunciadas nos parágrafos seguintes.

Suponhamos que o comprimento do passo é actualizado de acordo com a Figura 3.2. No algoritmo da Figura 3.1 a actualização do comprimento do passo em iterações sem sucesso

Actualização do comprimento do passo em métodos de procura em padrão

Na iteração $k = 0$ de um algoritmo de procura directa direcciona, considerar $\tau \in \mathbb{Q}$ com $\tau > 1$, $j_{max} \in \mathbb{N}_0$ e $j_{min} \in \mathbb{Z}^-$.

Se a iteração foi bem sucedida, então manter ou aumentar o comprimento do passo $\alpha_{k+1} = \tau^{j_k^+} \alpha_k$, com $j_k^+ \in \{0, 1, 2, \dots, j_{max}\}$. Caso contrário, reduzir o comprimento do passo $\alpha_{k+1} = \tau^{j_k^-} \alpha_k$, com $j_k^- \in \{j_{min}, \dots, -2, -1\}$.

Figura 3.2: Actualização do comprimento do passo de forma a gerar grelhas racionais.

corresponde a $\xi_k = \tau^{j_k^-}$, $\xi_{min} = \tau^{j_{min}}$ e $\xi_{max} = \tau^{-1}$.

Consideremos, agora, um algoritmo de procura directa direcciona que não efectue o passo de procura. Num passo de sondagem de um método de procura directa direcciona são testados os pontos correspondentes aos vectores de um conjunto gerador positivo. O uso deste tipo de direcções, em conjunto com a estratégia para a actualização do comprimento do passo descrita na Figura 3.2, implica que os métodos de procura directa direcciona gerem pontos pertencentes a grelhas, cujo espaçamento dos elementos que as constituem está directamente relacionado com o comprimento do passo considerado. Esta propriedade pode ser estendida a um qualquer método de procura directa direcciona que incorpore um passo de procura, desde que os pontos avaliados nesse passo pertençam à grelha considerada pelo algoritmo na iteração correspondente.

Em termos matemáticos, uma grelha em torno da iterada corrente do algoritmo, x_k , é definida como

$$M_k = \left\{ x_k + \alpha_k D z : z \in \mathbb{N}_0^{|D|} \right\}, \quad (3.4)$$

onde D é uma matriz n -por- $|D|$, cujas colunas correspondem aos vectores de um número finito de conjuntos geradores positivos. Numa estratégia de globalização por grelhas racionais, os conjuntos geradores positivos, D_k , seleccionados pelo algoritmo de procura directa direcciona (ver a Figura 3.1), são escolhidos entre os elementos de D . Supõe-se que nenhum D_k contém o vector nulo. A Figura 3.3 representa a grelha resultante de se considerar a base positiva $D = [I \ -I]$ com um comprimento do passo $\alpha_k = 1$.

Uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais obriga, ainda, a que cada direcção d pertencente a D seja o produto de uma matriz geradora não singular $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ por um vector de inteiros $z \in \mathbb{Z}^n$.

É fácil provar (ver Audet e Dennis [9]) que os pontos da grelha (3.4) estão suficientemente afastados entre si, no sentido em que dois pontos distintos distam entre si pelo menos uma

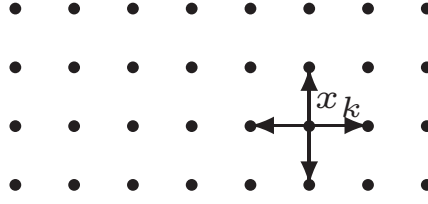


Figura 3.3: Uma grelha resultante do uso de uma base positiva maximal.

quantidade da ordem de α_k .

Lema 3.2.1. *Para qualquer inteiro $k \geq 0$,*

$$\min_{u \neq v \in M_k} \|u - v\| \geq \frac{\alpha_k}{\|G^{-1}\|}.$$

O lema seguinte (Audet e Dennis [9]) mostra que a sucessão dos comprimentos do passo é limitada superiormente, o que permite garantir a existência de subsucessões dos comprimentos do passo convergentes.

Lema 3.2.2. *Sob a Hipótese 3.2.2, existe um inteiro positivo r_{max} tal que $\alpha_k \leq \alpha_0 \tau^{r_{max}}$ para qualquer $k \geq 0$.*

O Teorema 3.2.2 estabelece um resultado análogo ao do Teorema 3.2.1, mas num contexto de grelhas racionais.

Teorema 3.2.2. *Sob a Hipótese 3.2.2, a sucessão dos comprimentos do passo gerada por um método de procura directa direcciona com uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais satisfaz*

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0.$$

3.2.4 Convergência global num contexto continuamente diferenciável

Estabelecida a existência de uma subsucessão de comprimentos do passo a convergir para zero, torna-se possível, sob determinadas hipóteses, provar a convergência para um ponto estacionário. Começemos por fazê-lo supondo que a função objectivo é continuamente diferenciável no conjunto $L(x_0)$ definido pela expressão (3.2).

Hipótese 3.2.3. *A função objectivo f é continuamente diferenciável num aberto contendo $L(x_0)$.*

À semelhança do que ocorre nos métodos de optimização baseados em derivadas, é necessário garantir que as direcções consideradas pelo algoritmo não se tornam, assintoticamente, demasiado ortogonais ao vector gradiente. Nos métodos de procura directa direccional esta condição pode assumir a forma de uma *medida do coseno* de um conjunto gerador positivo.

A *medida do coseno* de um conjunto gerador positivo, $\kappa(D_k)$, foi introduzida por Kolda, Lewis e Torczon [58] e é definida como

$$\kappa(D_k) = \min_{v \in \mathbb{R}^n, v \neq 0} \max_{d \in D_k, d \neq 0} \frac{v^\top d}{\|d\| \|v\|}.$$

A Proposição 3.1.2 garante que a medida do coseno, $\kappa(D_k)$, de qualquer conjunto gerador positivo, D_k , é estritamente positiva.

O próximo teorema permite estabelecer a convergência, sob a Hipótese 3.2.3, dos métodos de procura directa direccional para pontos estacionários. Este resultado sugere, ainda, um critério de paragem para os algoritmos pertencentes a esta classe baseado no valor do comprimento do passo. A demonstração (originalmente proposta em Kolda, Lewis e Torczon [58]) é incluída pois o tipo de análise envolvida relaciona-se com alguns dos resultados originais desta dissertação, apresentados no Capítulo 7.

Teorema 3.2.3. *Seja k uma iteração sem sucesso de um método de procura directa direccional. Sob a Hipótese 3.2.3, suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num conjunto aberto e convexo contendo a iterada corrente e o conjunto de sondagem $V_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}$, com constante de Lipschitz dada por $\gamma_{\nabla f} > 0$. Nestas condições, tem-se*

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \frac{1}{\kappa(D_k)} \left(\alpha_k \gamma_{\nabla f} d_{\max} + \frac{\rho(\alpha_k)}{\alpha_k \|d_k\|} \right), \quad (3.5)$$

ou

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \frac{1}{\kappa(D_k)} \alpha_k \gamma_{\nabla f} d_{\max}, \quad (3.6)$$

consoante se utilize, ou não, uma condição de decréscimo suficiente no passo de sondagem do algoritmo. A constante $d_{\max} > 0$ representa um limite superior para a norma dos vectores pertencentes a D_k .

Demonstração. Vamos demonstrar apenas a desigualdade (3.6). A demonstração de (3.5) segue os mesmos passos, entrando em consideração com o termo relativo à função $\rho(\cdot)$.

Em qualquer iteração sem sucesso, k ,

$$f(x_k + \alpha_k d) \geq f(x_k), \quad \forall d \in D_k.$$

Uma vez que D_k é um conjunto gerador positivo, existe $d_k \in D_k$ tal que

$$-\nabla f(x_k)^\top d_k \geq \kappa(D_k) \|\nabla f(x_k)\| \|d_k\|.$$

Aplicando o teorema do valor médio vem que

$$\begin{aligned} 0 &\leq f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \\ &= \alpha_k \nabla f(x_k + \alpha_k t_k d_k)^\top d_k, \text{ com } t_k \in (0, 1). \end{aligned}$$

Se dividirmos ambos os lados da inequação por α_k e subtrairmos $-\nabla f(x_k)^\top d_k$ obtemos

$$\begin{aligned} -\nabla f(x_k)^\top d_k &\leq [\nabla f(x_k + \alpha_k t_k d_k) - \nabla f(x_k)]^\top d_k \\ &\leq \alpha_k \gamma_{\nabla f} \|d_k\|^2. \end{aligned}$$

Então,

$$\kappa(D_k) \|\nabla f(x_k)\| \leq \alpha_k \gamma_{\nabla f} \|d_k\|,$$

o que implica o resultado pretendido. $\square$

Nota-se que no caso de ser considerada uma estratégia de globalização baseada numa condição de decréscimo suficiente do tipo (3.3) o resultado deste teorema passaria a ser

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \frac{1}{\kappa(D_k)} \left(\alpha_k \gamma_{\nabla f} d_{\max} + \frac{\rho(\alpha_k)}{\alpha_k d_{\min}} \right), \quad (3.7)$$

onde $d_{\min} > 0$ representa um limite inferior para a norma dos vectores em D_k .

Assim, desde que a medida do coseno de todos os conjuntos geradores positivos considerados pelo método de procura directa direcciona seja suficientemente afastada de zero, o teorema anterior, usado em conjunto com uma estratégia de globalização, garante a convergência de uma subsucessão das iteradas geradas pelo algoritmo para um ponto estacionário de primeira ordem. A demonstração é, também, incluída¹.

Teorema 3.2.4. *Sob a Hipótese 3.2.3, suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num aberto contendo $L(x_0)$. Suponhamos, ainda, que as direcções dos conjuntos geradores positivos, considerados pelo método de procura directa direcciona, são tais que $0 < d_{\min} \leq \|d_k\| \leq d_{\max}$, para todo o $d_k \in D_k$, com $d_{\min}$ e $d_{\max}$ independentes de k , e que $\kappa(D_k) > \kappa_{\min} > 0$, para todo o conjunto gerador positivo D_k . Supondo verdadeiras as*

¹Em bom rigor, para podermos aplicar o Teorema 3.2.3, o conjunto aberto mencionado no Teorema 3.2.4 deve conter os abertos referidos no Teorema 3.2.3, o que apenas é garantido para k suficientemente grande (uma vez que o uso de uma estratégia de globalização garante que α_k tende para zero).

hipóteses e condições necessárias a pelo menos uma das estratégias de globalização (o que inclui a Hipótese 3.2.1 ou 3.2.2), conclui-se que

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

Demonstração. O uso de uma estratégia de globalização garante que $\liminf_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0$. Atendendo à forma como o comprimento do passo é actualizado, tal significa que existe uma subsucessão de iteradas sem sucesso, com índices num conjunto $\mathcal{K}$, tal que $\lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_{k+1} = 0$. A imposição de um limite inferior para o parâmetro de actualização do comprimento do passo em iterações sem sucesso, $\xi_{\min} > 0$, permite concluir que, para $k \in \mathcal{K}$, $\alpha_{k+1} = \xi_k \alpha_k \geq \xi_{\min} \alpha_k$. Daqui facilmente se conclui que $\lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k = 0$, em que $k \in \mathcal{K}$ descreve índices de iterações sem sucesso. O resultado pretendido obtém-se recorrendo ao Teorema 3.2.3. $\square$

Nota-se que se considerarmos um número finito de conjuntos geradores positivos, como acontece quando se utiliza uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais, as condições relativas aos conjuntos geradores positivos, necessárias ao Teorema 3.2.4, são automaticamente satisfeitas.

Para estabelecer o Teorema 3.2.4 é fundamental a imposição de um limite inferior estritamente positivo, $\xi_{\min} > 0$, para o parâmetro de actualização do comprimento do passo em iterações sem sucesso. O exemplo seguinte, sugerido por Audet [7], ilustra uma situação em que tal não sucede, resultando na convergência de uma subsucessão gerada por um método de procura directa direcciona para um ponto não estacionário.

Considere-se, em $\mathbb{R}$, a minimização da função $f(x) = (x+1)^2$, recorrendo a um método de procura directa direcciona com uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais. Seja $x_0 = 1$, $\alpha_0 = \frac{1}{2}$ e $D = [1 \ -1]$. Em cada iteração com sucesso, k , actualize-se o comprimento do passo, de forma a que $\alpha_{k+1} = 4$. Se k é uma iteração mal sucedida, então $\alpha_{k+1} = 2^{-\frac{k+1}{2}-3} \alpha_k$. Na Tabela 3.1 encontra-se um resumo das iterações do algoritmo.

A sucessão dos parâmetros de actualização do comprimento do passo para iterações sem sucesso, $\left\{2^{-\frac{k+1}{2}-3}\right\}$, converge para zero. Como consequência, a sucessão de iteradas gerada pelo algoritmo converge para zero, que não é um ponto estacionário da função.

O resultado de convergência global estabelecido no Teorema 3.2.4 pode ser generalizado de limite inferior a limite, desde que se consiga garantir que toda a sucessão de comprimentos do passo converge para zero e que o valor da função objectivo correspondente a uma iteração bem sucedida não excede o valor da função objectivo calculado no conjunto gerador positivo considerado na mesma iteração.

Hipótese 3.2.4. *Suponhamos que:*

- Em qualquer iteração com sucesso, k , $f(x_{k+1}) \leq f(x_k + \alpha_k d)$, $\forall d \in D_k$.

iteração k	x_k	α_k	ξ_k
0	1	1/2	8
1	1/2	4	1/16
2	1/2	1/4	16
3	1/4	4	1/32
4	1/4	1/8	32
5	1/8	4	1/64
6	1/8	1/16	64
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Tabela 3.1: Resumo das iterações resultantes da aplicação de um método de procura directa direccional, sem limite inferior estritamente positivo para o parâmetro de actualização do comprimento do passo em iterações sem sucesso.

- $\lim_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0$.

Se optarmos por não aumentar o comprimento do passo em todas as iterações com sucesso, então, recorrendo aos Teoremas 3.2.1 ou 3.2.2, a segunda condição é trivialmente satisfeita. Uma estratégia de globalização baseada na imposição de uma condição de decréscimo suficiente permite obter um resultado do mesmo tipo, existindo, neste caso, uma maior flexibilidade na actualização do comprimento do passo em iterações bem sucedidas (ver, por exemplo, a Secção 7.3). Para satisfazer a primeira condição basta-nos não efectuar o passo de procura e substituir o passo de sondagem oportunista por um passo de sondagem completo.

Proposição 3.2.1. *Sob as Hipóteses 3.2.3 e 3.2.4, suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num conjunto aberto e convexo contendo a iterada corrente e o conjunto de sondagem $V_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}$. Suponhamos ainda que as direcções dos conjuntos geradores positivos, consideradas pelo método de procura directa direccional, são tais que $0 < d_{\min} \leq \|d_k\| \leq d_{\max}$, para todo o $d_k \in D_k$, com $d_{\min}$ e $d_{\max}$ independentes de k , e que $\kappa(D_k) > \kappa_{\min} > 0$, para todo o conjunto gerador positivo D_k . Então, um método de procura directa direccional gera iteradas tais que, para qualquer $\eta > 0$, existem $\delta, \sigma > 0$, independentes de k , para os quais, quando $\|\nabla f(x_k)\| > \eta$ e $\alpha_k < \delta$, se tem que*

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \sigma \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|.$$

O uso de um argumento semelhante ao introduzido por Thomas [87], no contexto dos métodos de regiões de confiança para optimização com derivadas, permite obter na forma de limite o resultado do Teorema 3.2.4.

Teorema 3.2.5. *Sob as Hipóteses 3.2.1, 3.2.3 e 3.2.4, suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num aberto contendo $L(x_0)$. Suponhamos, ainda, que as direcções dos*

conjuntos geradores positivos considerados pelo método de procura directa direcciona são tais que $0 < d_{\min} \leq \|d_k\| \leq d_{\max}$, para todo o $d_k \in D_k$, com $d_{\min}$ e $d_{\max}$ independentes de k , que $\kappa(D_k) > \kappa_{\min} > 0$, para todo o conjunto gerador positivo D_k e que $\|x_{k+1} - x_k\| \leq \alpha_k d_{\max}$. Então

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

A hipótese da continuidade à Lipschitz do gradiente ∇f permite simplificar a demonstração dos resultados anteriores. No entanto, é possível estabelecer resultados análogos supondo apenas que f é continuamente diferenciável num conjunto de interesse.

3.2.5 Convergência global num contexto não suave

Supor que a função objectivo é continuamente diferenciável pode ser demasiado exigente num contexto de OSD. Esta foi uma das motivações que levaram Audet e Dennis [9] a estabelecer uma análise de convergência para a classe dos métodos de procura em padrão sob hipóteses não suaves.

Nesta subsecção, adaptamos essa análise de convergência aos métodos de procura directa direcciona. Começamos por introduzir o conceito de derivada direcciona generalizada de Clarke, definida para funções contínuas à Lipschitz (ver Clarke [18]).

Definição 3.2.1. *Seja f contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* . A derivada direcciona generalizada de Clarke da função f , calculada em x_* , na direcção v é o limite*

$$f^\circ(x_*; v) = \limsup_{\substack{y \rightarrow x_* \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + tv) - f(y)}{t}.$$

Se a função f for decrescente ao longo da direcção v , a partir do ponto x_* , então $f^\circ(x_*; v) < 0$. Assim sendo, um primeiro resultado de estacionariedade consiste em garantir a existência de um ponto x_* para o qual $f^\circ(x_*; v) \geq 0, \forall v \in \mathbb{R}^n$.

Uma função é estritamente diferenciável num ponto x_* (segundo a definição de Clarke [18]) se for contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* e existir um vector $\nabla f(x_*)$ tal que

$$\lim_{\substack{y \rightarrow x_* \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + tv) - f(y)}{t} = \nabla f(x_*)^\top v, \quad \forall v \in \mathbb{R}^n.$$

A definição de *subsucção refinada*, estabelecida por Audet e Dennis [9] no contexto da procura em padrão, pode ser generalizada a qualquer algoritmo de procura directa direcciona que, em cada iteração k , avalie a função objectivo num conjunto de sondagem da forma

$\{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}$, onde D_k representa um conjunto gerador positivo e $\alpha_k > 0$ designa o comprimento do passo.

Uma subsucessão $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ de iteradas gerada por um método de procura directa direccional diz-se uma subsucessão refinada se as condições seguintes forem satisfeitas:

1. x_k é uma iterada sem sucesso, ou seja, $f(x_k) \leq f(x_k + \alpha_k d)$, para todo o $d \in D_k$ (ou $f(x_k) \leq f(x_k + \alpha_k d) + \rho(\alpha_k)$, para todo o $d \in D_k$, no caso de ser imposta uma condição de decréscimo suficiente do tipo (3.3));
2. $\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ converge para zero.

A análise de convergência global, num contexto não suave, começa por provar a existência de subsucessões refinadas convergentes (ver Audet e Dennis [9]).

Teorema 3.2.6. *Sejam verdadeiras a Hipótese 3.2.2 e todas as hipóteses necessárias a pelo menos uma estratégia de globalização. Nestas condições, um método de procura directa direccional gera pelo menos uma subsucessão refinada convergente.*

Demonstração. Considerando a forma como o comprimento do passo é actualizado em iterações sem sucesso e a existência de $\xi_{\min} > 0$, o uso de uma estratégia de globalização garante, recorrendo a argumentos análogos aos utilizados na demonstração do Teorema 3.2.4, a existência de uma subsucessão de iteradas sem sucesso, $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, tal que $\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ converge para zero. A Hipótese 3.2.2 permite extrair de $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão convergente. $\square$

O próximo teorema (ver Audet e Dennis [9]) dá-nos um primeiro resultado indicativo de estacionariedade num contexto não suave.

Teorema 3.2.7. *Seja verdadeira a Hipótese 3.2.2 e todas as hipóteses necessárias a pelo menos uma estratégia de globalização. Seja, ainda, x_* o limite de uma subsucessão refinada convergente. Suponhamos que f é avaliada num número infinito de passos de sondagem correspondentes à subsucessão refinada, utilizando a mesma direcção d . Se f for contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* , então $f^\circ(x_*; d) \geq 0$.*

Demonstração. Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* . Como f é contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* , a derivada direccional generalizada de Clarke está bem definida em x_* , pelo que, quando não é usado decréscimo suficiente,

$$f^\circ(x_*; d) = \limsup_{\substack{y \rightarrow x_* \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + td) - f(y)}{t} \geq \limsup_{k \in \mathcal{K}} \frac{f(x_k + \alpha_k d) - f(x_k)}{\alpha_k}.$$

O último quociente

$$\frac{f(x_k + \alpha_k d) - f(x_k)}{\alpha_k} \quad (3.8)$$

é não negativo, uma vez que x_k é um elemento da subsucessão refinada e, como tal, uma iterada sem sucesso. Logo, o seu $\limsup$ é não negativo.

Se se utilizar decréscimo suficiente o quociente (3.8) pode ser escrito na forma

$$\frac{f(x_k + \alpha_k d) - f(x_k) + \rho(\alpha_k)}{\alpha_k} - \frac{\rho(\alpha_k)}{\alpha_k},$$

e, pelas propriedades da função $\rho(\cdot)$, a conclusão é semelhante. $\square$

A interpretação deste resultado deve ser feita com algum cuidado, uma vez que o mesmo não implica que o ponto x_* seja um ponto estacionário. Para que o fosse, seria necessário que $f^\circ(x_*; v) \geq 0$ para todo o vector $v \in \mathbb{R}^n$ e não apenas para as direcções de um conjunto gerador positivo. O resultado estabelecido no Teorema 3.2.7 pode ser fortalecido, exigindo-se uma maior suavidade da função objectivo e considerando, adicionalmente, a Hipótese 3.2.5 em baixo.

Hipótese 3.2.5. *Em qualquer subsucessão refinada convergente, existe um conjunto gerador positivo D' que é usado um número infinito de vezes.*

Esta hipótese é trivialmente satisfeita no caso em que é usada uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais (ver Audet e Dennis [9]), uma vez que, neste caso, se supõe que D é finito.

Corolário 3.2.1. *Sejam verdadeiras as Hipóteses 3.2.2 e 3.2.5 e todas as hipóteses necessárias a pelo menos uma estratégia de globalização. Seja x_* o limite de uma subsucessão refinada convergente. Se f for estritamente diferenciável em x_* então $\nabla f(x_*) = 0$.*

Demonstração. Uma vez que f é estritamente diferenciável em x_* , existe um vector $\nabla f(x_*)$ tal que $f^\circ(x_*; v) = \nabla f(x_*)^\top v, \forall v \in \mathbb{R}^n$. Suponhamos que $\nabla f(x_*) \neq 0$. Seja D' o conjunto gerador positivo que é usado um número infinito de vezes na subsucessão refinada. Pelo Teorema 3.2.7, para cada $d \in D'$, vem que $\nabla f(x_*)^\top d \geq 0$.

Consideremos $v \neq 0, v \in \mathbb{R}^n$, um vector não ortogonal a $\nabla f(x_*)$. Como D' é um conjunto gerador positivo, o vector v pode escrever-se como combinação linear positiva dos elementos de D' . Desta forma, $\nabla f(x_*)^\top v \geq 0$. Considerando, agora, $-v$ e repetindo o raciocínio obtemos $-\nabla f(x_*)^\top v \geq 0$, pelo que se conclui que $\nabla f(x_*) = 0$. $\square$

Abramson [2] analisou a convergência global para pontos estacionários de segunda ordem dos métodos de procura em padrão (instância particular de um método de procura directa direccionada, que utiliza uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais). Este

autor provou que um método de procura em padrão não pode gerar uma sucessão de iteradas a convergir para um maximizante local estrito e que a convergência para um maximizante local só ocorre em condições muito particulares, resultados que não são surpreendentes dadas as características direccionais dos métodos em causa.

Supondo que f é duas vezes continuamente diferenciável e supondo, em cada iteração, que o conjunto gerador positivo considerado contém uma base ortonormada para $\mathbb{R}^n$ e os seus simétricos, Abramson [2] prova, ainda, a existência de uma subsucessão de iteradas convergente para um ponto que satisfaz a seguinte condição

$$d^\top \nabla^2 f(x_*) d \geq 0, \forall d \in D,$$

em que $D = [B \ -B]$, com B uma base ortonormada de $\mathbb{R}^n$, e em que x_* representa o ponto limite da subsucessão. Nota-se que, sendo $D \neq \mathbb{R}^n$, esta condição não é suficiente para garantir estacionariedade de segunda ordem.

3.3 O método de procura directa com grelha adaptável

Quando se pretende otimizar funções não suaves, deve interpretar-se, com cuidado, os resultados de convergência expostos nas Subsecções 3.2.4 e 3.2.5. Tome-se o exemplo apresentado em Kolda, Lewis e Torczon [58] para uma variante da função de Dennis-Woods:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \max \left(\left\| \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \right\|^2, \left\| \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \right\|^2 \right).$$

As curvas de nível correspondentes a esta função encontram-se representadas na Figura 3.4. Trata-se de uma função contínua e estritamente convexa, mas cujo gradiente é descontínuo ao longo da recta $x_1 = x_2$. O mínimo é obtido no ponto $[0, 0]^\top$.

Consideremos a minimização desta função recorrendo a um método de procura directa direccional com uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais, que utiliza como direcções de sondagem $D_k = [I - I]$. Independentemente do ponto inicial considerado, verifica-se ser frequente a convergência numérica do algoritmo para um ponto do tipo $[a, a]^\top$, com $a \neq 0$. Em qualquer um destes pontos, o algoritmo de procura directa direccional é incapaz de identificar uma direcção de descida. Esta ‘contradição’ com os resultados de convergência apresentados nas subsecções anteriores é apenas aparente. De facto, conforme já foi referido, o Teorema 3.2.7 não garante que o ponto x_* seja estacionário.

O comportamento descrito resulta da finidade dos conjuntos de direcções de sondagem considerados, tipicamente, num método de procura directa direccional. Vimos que esta

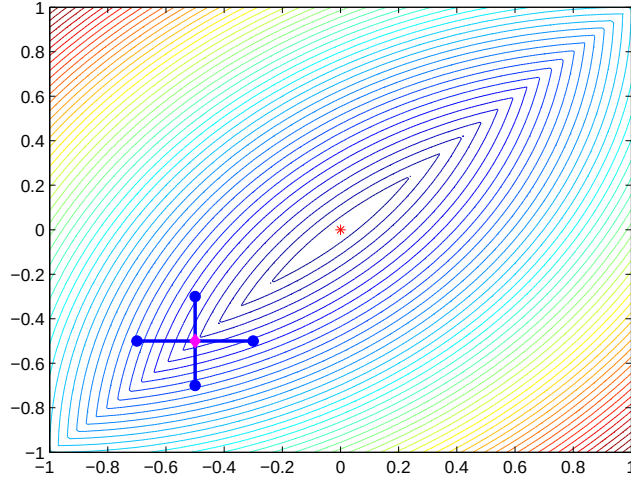


Figura 3.4: Minimização de uma variante da função de Dennis-Woods por um método de procura directa direccional.

condição é essencial no caso do uso de uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais. Quando a estratégia de globalização se baseia numa condição de decréscimo suficiente, considerar apenas um conjunto finito de direcções de sondagem é uma forma prática de implementar a condição $\kappa(D_k) > k_{min} > 0$, para todo o k , à semelhança do que é sugerido por Kolda, Lewis e Torczon [60].

O desenvolvimento de um método que permita considerar um conjunto infinito de direcções de sondagem e que, simultaneamente, permita a resolução de problemas com restrições gerais, e não apenas lineares, como acontece com a procura directa direccional (ver o Capítulo 8), constituíram a motivação para Audet e Dennis [11] desenvolverem o método de procura directa com grelha adaptável, que passamos a descrever.

3.3.1 Uma descrição resumida do algoritmo

Embora o método de procura directa com grelha adaptável permita a resolução de problemas de optimização com restrições, nesta subsecção abordaremos apenas o caso sem restrições, adiando uma breve discussão das restrições para o Capítulo 8.

O método de procura directa com grelha adaptável pode ser visto como uma instância do algoritmo descrito na Figura 3.1, com a particularidade da união de todos os conjuntos de direcções de sondagem considerados no decurso do processo de optimização ser, quase certamente, um conjunto de direcções denso em $\mathbb{R}^n$. Um conjunto de direcções diz-se denso em $\mathbb{R}^n$ se o fecho do cone por si gerado (positivamente) for igual a $\mathbb{R}^n$.

Quer no passo de procura, quer no passo de sondagem do algoritmo, a função objectivo

é avaliada em pontos pertencentes à grelha

$$M_k = \cup_{x \in C_k} \{x + \alpha_k D z : z \in \mathbb{N}_0^{|D|}\}, \quad (3.9)$$

construída a partir de um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$, D , e envolvendo um parâmetro de comprimento do passo, α_k . O conjunto finito C_k inclui todos os pontos para os quais a função objectivo foi avaliada até ao início da iteração k , garantindo-se, desta forma, que todos os pontos visitados pelo algoritmo pertencem à grelha corrente. Cada direcção $d \in D$ deve ser um produto Gz , onde $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz geradora não singular e $z \in \mathbb{Z}^n$. A definição de grelha, traduzida na equação (3.4), foi generalizada por Audet e Dennis [11] usando a equação (3.9), com o intuito de incluir mais pontos passíveis de avaliação no passo de procura destes algoritmos.

O passo de procura é, em tudo, idêntico ao de um método de procura directa direccionada com uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais (*i.e.*, um método de procura em padrão). Este passo consiste num número finito de avaliações da função objectivo na grelha M_k (agora dada por (3.9)), com o intuito de reduzir o valor da função objectivo. A principal diferença entre o método de procura directa com grelha adaptável e um método de procura em padrão reside na construção do conjunto gerador positivo, D_k , a utilizar no passo de sondagem, que deixa de estar incluído em D .

Na iteração k de um método de procura directa com grelha adaptável, a função objectivo é avaliada no conjunto de sondagem

$$V_k = \{x_k + \alpha_k d_k : d_k \in D_k\} \subset M_k, \quad (3.10)$$

onde D_k é um conjunto gerador positivo cujos elementos $d_k \in D_k$ satisfazem:

- d_k pode ser escrito como uma combinação inteira não negativa das direcções de D ;
- a distância de x_k a um ponto de sondagem $x_k + \alpha_k d_k$ tende para zero se e só se α_k tende para zero:

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k \|d_k\| = 0 \iff \lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k = 0;$$

- os limites de subsucessões convergentes dos conjuntos normalizados $\bar{D}_k = \{d_k / \|d_k\| : d_k \in D_k\}$ são conjuntos geradores positivos para $\mathbb{R}^n$.

Se um dos passos de procura ou de sondagem for bem sucedido, então a iterada corrente passa a ser o ponto que reduz o valor da função objectivo, a iteração diz-se bem sucedida e o comprimento do passo, α_k , é mantido ou mesmo aumentado. Caso contrário, a iteração diz-se sem sucesso, a iterada corrente x_k é mantida e α_k é reduzido. As regras para expandir

ou contrair a grelha, através da actualização do valor de α_k , são idênticas às de um método de procura em padrão e estão descritas na Figura 3.2.

3.3.2 Análise de convergência global

Supondo verdadeira a Hipótese 3.2.2 e recorrendo a argumentos semelhantes aos utilizados nos métodos de procura directa direccionada baseados em grelhas racionais, Audet e Dennis [11] garantem a existência de subsucessões refinadas convergentes (ver o Teorema 3.2.6). Este conceito é estendido às direcções usadas pelo algoritmo, através da definição de *direcção refinada*.

Definição 3.3.1. *Seja x_* o limite de uma subsucessão refinada convergente, $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$. Se existir o limite $\lim_{k \in \mathcal{L}} \frac{d_k}{\|d_k\|}$, com $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ e $d_k \in D_k$, então este limite diz-se uma direcção refinada em x_* .*

Audet e Dennis [11] garantem, ainda, a existência de direcções refinadas. O próximo teorema, semelhante ao Teorema 3.2.7 estabelecido para a procura directa direccionada, consiste num primeiro resultado de estacionariedade para o método de procura directa com grelha adaptável num contexto não suave.

Teorema 3.3.1. *Supondo verdadeira a Hipótese 3.2.2, seja f contínua à Lipschitz numa vizinhança do limite, x_* , de uma subsucessão refinada convergente. Se v é uma direcção refinada em x_* , então $f^\circ(x_*; v) \geq 0$.*

Demonstração. Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* e $v = \lim_{k \in \mathcal{L}} \frac{d_k}{\|d_k\|}$ uma direcção refinada em x_* , com $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ e $d_k \in D_k$. Como a função f é contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* , as propriedades da derivada direccionada generalizada de Clarke [18] garantem que

$$f^\circ(x_*; v) = f^\circ\left(x_*; \lim_{k \in \mathcal{L}} \frac{d_k}{\|d_k\|}\right) = \lim_{k \in \mathcal{L}} f^\circ\left(x_*; \frac{d_k}{\|d_k\|}\right).$$

Como $\{\alpha_k \|d_k\|\}$ converge para zero temos que

$$f^\circ(x_*; v) \geq \limsup_{k \in \mathcal{L}} \frac{f(x_k + \alpha_k \|d_k\| \frac{d_k}{\|d_k\|}) - f(x_k)}{\alpha_k \|d_k\|} = \limsup_{k \in \mathcal{L}} \frac{f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k)}{\alpha_k \|d_k\|} \geq 0.$$

A última desigualdade resulta de x_k ser uma iterada sem sucesso. $\square$

O próximo teorema é uma consequência directa do Teorema 3.3.1 e estabelece a estacionariedade dos pontos limite correspondentes a subsucessões geradas pelo método de procura directa com grelha adaptável.

Teorema 3.3.2. *Supondo verdadeira a Hipótese 3.2.2, seja f contínua à Lipschitz numa vizinhança do limite, x_* , de uma subsucessão refinada convergente. Se o conjunto de direcções refinadas em x_* for denso em $\mathbb{R}^n$ então*

$$f^\circ(x_*; v) \geq 0, \forall v \in \mathbb{R}^n.$$

Na Subsecção 3.3.3 é descrita a implementação LTMADS, proposta por Audet e Dennis [11], como forma de garantir, quase certamente, a geração de um conjunto de direcções refinadas assintoticamente denso em $\mathbb{R}^n$.

Abramson e Audet [3] provam resultados de convergência global para pontos estacionários de segunda ordem, para pontos limite da sucessão de iteradas gerada por um método de procura directa com grelha adaptável. Como hipótese, supõem que o conjunto de direcções refinadas, num ponto limite, x_* , de uma subsucessão refinada convergente, é denso em $\mathbb{R}^n$. Nestas condições, provam também que se f for continuamente diferenciável num aberto contendo x_* , duas vezes estritamente diferenciável em x_* e se $\nabla^2 f(x_*)$ for não singular, então x_* é um minimizante local estrito.

3.3.3 A implementação LTMADS

Para garantir um conjunto de direcções refinadas assintoticamente denso em $\mathbb{R}^n$, Audet e Dennis [11] propuseram uma versão estocástica de um método de procura directa com grelha adaptável, que designaram por LTMADS (*Lower Triangular Matrix based Mesh Adaptive Direct Search*).

Nesta estratégia, considera-se a matriz identidade como matriz geradora $G = I$, $D = [I \ -I]$, $\tau = 4$, $j_k^+ = 1$ ou $j_k^+ = 0$ e $j_k^- = -1$. O valor inicial do comprimento do passo é $\alpha_0 = 1$ e a sua actualização é feita de acordo com:

$$\alpha_{k+1} = \begin{cases} \frac{\alpha_k}{4}, & \text{se } k \text{ for uma iteração sem sucesso,} \\ 4\alpha_k, & \text{se } k \text{ for uma iteração com sucesso e } \alpha_k \leq \frac{1}{4}, \\ \alpha_k, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Daqui resulta que o comprimento do passo é sempre uma potência de 4 e nunca excede 1.

Em cada iteração, é gerado um conjunto de direcções a serem exploradas no passo de sondagem. Uma destas direcções é independente do contador de iteração, dependendo somente do valor de α_k . A Figura 3.5 apresenta um procedimento para o cálculo desta direcção, designada por $b(\ell)$, onde ℓ é um inteiro tal que $\ell = -\log_4(\alpha_k)$. O vector $b(\ell)$ é um vector de inteiros, com uma componente igual a $+2^\ell$ ou -2^ℓ e as restantes $n - 1$ componentes geradas aleatoriamente, com igual probabilidade, no conjunto de inteiros $\{-2^\ell + 1, -2^\ell + 2, \dots, 2^\ell - 1\}$.

Geração da direcção $b(\ell)$ para um dado inteiro ℓ **Verificação da existência de $b(\ell)$**

Se $b(\ell)$ já foi calculado então interromper este procedimento e utilizar o vector determinado. Caso contrário, prosseguir para o passo seguinte.

Escolha do índice da componente de maior magnitude

Seja $\hat{i}$ um inteiro uniformemente gerado no conjunto $N = \{1, \dots, n\}$.

Cálculo de $b(\ell)$

Seja $b_{\hat{i}}(\ell)$ igual a $+2^\ell$ ou -2^ℓ , com igual probabilidade. Para $i \in N \setminus \{\hat{i}\}$ seja $b_i(\ell)$ um inteiro em $\{-2^\ell + 1, -2^\ell + 2, \dots, 2^\ell - 1\}$, escolhido com igual probabilidade. Guardar $b(\ell)$.

Figura 3.5: Cálculo, segundo a implementação LTMADS, de uma direcção apenas dependente do comprimento do passo.

Esta direcção $b(\ell)$ é posteriormente combinada com $n - 1$ direcções geradas a partir de uma matriz triangular inferior, constituindo uma matriz não singular em $\mathbb{R}^{n \times n}$. A aplicação do Corolário 3.1.2 permite, posteriormente, obter uma base positiva para $\mathbb{R}^n$.

Consideremos uma permutação das linhas de uma matriz triangular inferior L em $\mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$. A permutação tem como objectivo garantir que os zeros não estão concentrados na parte superior da matriz. Na posição $\hat{i}$, com $\hat{i}$ resultante da geração do vector $b(\ell)$ (ver a Figura 3.5), insere-se uma linha de zeros, obtendo-se uma matriz de dimensão $n \times (n - 1)$. Acrescenta-se às colunas desta matriz o vector $b(\ell)$, que constituirá a n -ésima coluna. A matriz não singular, necessária à aplicação do Corolário 3.1.2, é obtida por permutação das colunas desta última matriz. Neste caso, a permutação tem o propósito de garantir que os elementos nulos estão dispersos pelas colunas da matriz. A Figura 3.6 mostra esquematicamente o procedimento descrito.

Esta construção garante que $|\det(B)| = |\det(B')| = 2^{n\ell}$ e que $b(\ell)$ é uma coluna do conjunto gerador positivo D_k . Audet, Custódio e Dennis [8] mostram que o procedimento descrito gera conjuntos de direcções de sondagem que satisfazem a definição de D_k dada a seguir a (3.10). Audet e Dennis [11] provam, ainda, que, quando o número de iterações tende para infinito, a união dos vectores $b(\ell)$ forma um conjunto de direcções denso em $\mathbb{R}^n$. Provam também que, se a sucessão de iteradas geradas pelo algoritmo de procura directa for convergente, então o conjunto de direcções refinadas no ponto limite correspondente é, quase certamente, denso em $\mathbb{R}^n$.

Cálculo do conjunto gerador positivo D_k **Cálculo de $b(\ell)$ e determinação de $\hat{i}$**

Seja $\ell = -\log_4(\alpha_k)$. Calcular $b(\ell)$ e determinar $\hat{i}$ de acordo com o procedimento descrito na Figura 3.5.

Construção de uma matriz triangular inferior em $\mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$

Seja $L \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ uma matriz triangular inferior, onde cada elemento da diagonal é $+2^\ell$ ou -2^ℓ , com igual probabilidade, e as restantes componentes não nulas são uniformemente geradas em $\{-2^\ell + 1, -2^\ell + 2, \dots, 2^\ell - 1\}$.

Permutação das linhas de L e completção para uma base linear para $\mathbb{R}^n$

Seja $N = \{1, \dots, n\}$ e consideremos $\{p_1, \dots, p_{n-1}\}$ uma permutação aleatória do conjunto $N \setminus \{\hat{i}\}$. Sejam

$$\begin{aligned} B_{p_i, j} &= L_{i, j} & \text{para } i, j = 1, 2, \dots, n-1, \\ \hat{B}_{i, j} &= 0 & \text{para } j = 1, 2, \dots, n-1, \\ B_{i, n} &= b_i(\ell) & \text{para } i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Permutação das colunas de B

Seja $\{q_1, \dots, q_n\}$ uma permutação aleatória do conjunto N . Consideremos $B'_{i, q_j} = B_{i, j}$, para $i, j = 1, \dots, n$.

Completção para uma base positiva

Para obter uma base positiva minimal considerar $D_k = [B' \ d]$, com $d_i = -\sum_{j \in N} B'_{i, j}$. Se se pretender uma base positiva maximal, então considerar $D_k = [B' \ -B']$.

Figura 3.6: Cálculo, de acordo com a implementação LTMADS, dos conjuntos geradores positivos a utilizar no passo de sondagem do algoritmo de procura directa com grelha adaptável.

Capítulo 4

Métodos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas globalmente convergentes

Um algoritmo de procura unidireccional baseada em derivadas simplécticas explora uma direcção definida recorrendo a este tipo de derivadas. Na Secção 4.1 faremos uma breve abordagem ao cálculo de derivadas simplécticas e à estimativa do seu erro, enquanto aproximações das verdadeiras derivadas. Como exemplo de um método pertencente a esta classe temos o algoritmo de filtro implícito de Bortz e Kelley [15]. Conn, Scheinberg e Vicente [24] propuseram um enquadramento algorítmico para este método, que garante propriedades de convergência global para pontos estacionários de primeira ordem. Este enquadramento será descrito e analisado na Secção 4.2.

4.1 Derivadas simplécticas

O primeiro passo para o cálculo de uma derivada simpléctica de uma função consiste na selecção de um conjunto de pontos de amostragem, para o qual seja conhecido o valor da função. A qualidade da aproximação e da estimativa do erro da aproximação depende directamente da geometria do conjunto de pontos utilizado no cálculo. As derivadas simplécticas de primeira ordem são o objecto de estudo da Subsecção 4.1.1. Na Subsecção 4.1.3 são feitas algumas considerações sobre as propriedades geométricas que devem satisfazer os conjuntos de amostragem. A Subsecção 4.1.2 respeita ao cálculo de derivadas simplécticas a partir de conjuntos de amostragem que não dispõem de um número de pontos adequado. Nesta subsecção inclui-se o cálculo de Hessianas simplécticas.

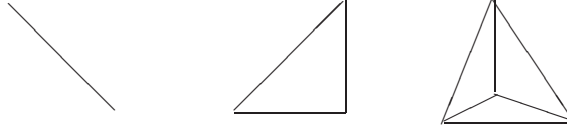


Figura 4.1: Exemplos de conjuntos simpléticos de dimensão 1, 2 e 3.

4.1.1 Definição e erro dos gradientes simpléticos

Uma derivada simplética de primeira ordem designa-se por gradiente simplético. Para calcular um gradiente simplético é necessário avaliar a função em causa num conjunto com $n + 1$ pontos, independente afim. Seguimos a definição de independência afim introduzida por Rockafeller [84].

Definição 4.1.1. *Um conjunto de pontos $\{y^0, y^1, \dots, y^m\}$ diz-se independente afim em $\mathbb{R}^n$, com $m \leq n$, se o conjunto de vectores $\{y^1 - y^0, \dots, y^m - y^0\}$ for linearmente independente.*

O invólucro convexo de um conjunto independente afim com $m + 1$ elementos designa-se por um *conjunto simplético* de dimensão m . Os $m + 1$ pontos constituem os vértices do conjunto simplético. Alguns exemplos deste tipo de conjuntos encontram-se representados na Figura 4.1. É óbvio que um conjunto simplético em $\mathbb{R}^n$ não pode ter mais do que $n + 1$ pontos.

Consideremos uma função f e um conjunto simplético com vértices $y^0, \dots, y^n$, para o qual se conhecem os valores $f(y^0), \dots, f(y^n)$. Uma vez que o conjunto $\{y^0, y^1, \dots, y^n\}$ é independente afim, a matriz $S = [y^1 - y^0 \cdots y^n - y^0]$ é não singular. Define-se o gradiente simplético de f calculado em y^0 , $\nabla_s f(y^0)$, como

$$\nabla_s f(y^0) = S^{-\top} \delta(f; S),$$

onde $\delta(f; S) = [f(y^1) - f(y^0) \cdots f(y^n) - f(y^0)]^\top$.

O gradiente simplético está directamente relacionado com a interpolação polinomial multivariada. De facto, é fácil provar que as componentes de um gradiente simplético coincidem com os coeficientes do modelo linear $m(y) = f(y^0) + \nabla_s f(y^0)^\top (y - y^0)$, centrado em y^0 e que interpola f no conjunto $\{y^1, \dots, y^n\}$.

Mifflin [75] e Choi e Kelley [17] utilizam, como alternativa a $\nabla_s f(y^0)$, gradientes simpléc-

ticos centrados, calculados como

$$\nabla_{sc}f(y^0) = \frac{S^{-\top}(\delta(f; S) - \delta(f; -S))}{2},$$

onde $\delta(f; -S) = [f(2y^0 - y^1) - f(y^0) \cdots f(2y^0 - y^n) - f(y^0)]^\top$.

O erro associado a estes dois gradientes, enquanto aproximações do verdadeiro gradiente $\nabla f(y^0)$, foi quantificado por Kelley [57]. Supondo que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num aberto contendo $\{y^0, y^1, \dots, y^n\}$, com constante de Lipschitz $\gamma_{\nabla f} > 0$, prova-se, facilmente, que

$$\|\nabla f(y^0) - \nabla_{sc}f(y^0)\| \leq \sqrt{n}\gamma_{\nabla f} \left\| \left(\frac{S^\top}{\Delta} \right)^{-1} \right\| \Delta,$$

onde $\Delta = \max_{1 \leq i \leq n} \|y^i - y^0\|$.

4.1.2 Derivadas simplécticas não determinadas

Na prática, podemos ter um conjunto com $q+1 \neq n+1$ pontos para utilizar no cálculo de um gradiente simpléctico. A definição seguinte é adoptada por Conn, Scheinberg e Vicente [26].

Definição 4.1.2. *Consideremos um conjunto de pontos $\{y^0, \dots, y^q\}$ em $\mathbb{R}^n$ para os quais se conhece o valor de f . Seja $S = [y^1 - y^0 \cdots y^q - y^0]$. O conjunto diz-se equilibrado para a construção de um gradiente simpléctico de f , calculado em y^0 , se a característica da matriz S é igual a $\min\{n, q\}$.*

As noções de conjunto independente afim e conjunto equilibrado coincidem quando $q \leq n$. A independência afim não está definida para $q > n$.

Quando dispomos de um conjunto de pontos equilibrado, os gradientes simplécticos podem ser interpretados como ‘soluções’ do sistema

$$S^\top \nabla_{sc}f(y^0) = \delta(f; S),$$

onde $S = [y^1 - y^0 \cdots y^q - y^0]$ e $\delta(f; S) = [f(y^1) - f(y^0) \cdots f(y^q) - f(y^0)]^\top$. Quando $q < n$ (caso subdeterminado), o sistema é indeterminado e pode ser calculada, por exemplo, uma solução de norma mínima. Quando $q > n$ (caso sobredeterminado) o sistema é impossível e pode ser calculada uma solução no sentido dos mínimos quadrados. À semelhança do caso determinado, estas duas formas de gradientes simplécticos (sub e sobredeterminados) coincidem, respectivamente, com os gradientes dos respectivos modelos de interpolação linear de norma mínima (se $q < n$) ou de regressão linear pelo método dos mínimos quadrados (quando $q > n$).

Em qualquer dos casos (determinado, subdeterminado ou sobredeterminado), um gradiente simpléctico pode ser expresso como $\nabla_s f(y^0) = V\Sigma^{-1}U^\top \delta(f; S)/\Delta$, onde $U\Sigma V^\top$ é uma decomposição em valores singulares (na sua forma reduzida) de $S^\top/\Delta$ e $\Delta = \max_{1 \leq i \leq q} \|y^i - y^0\|$. A divisão por Δ permite o escalonamento dos pontos no interior de uma bola unitária centrada em y^0 , evidenciando a ligação entre a geometria do conjunto de pontos e a qualidade dos gradientes simplécticos como aproximações dos verdadeiros gradientes (ver o Teorema 4.1.1).

Supondo que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz, Conn, Scheinberg e Vicente [26, 23] estabeleceram limites para o erro dos gradientes simplécticos como aproximações do verdadeiro gradiente da função. O Teorema 4.1.1 resume os três casos possíveis.

Teorema 4.1.1. *Seja $\{y^0, y^1, \dots, y^q\}$ um conjunto equilibrado para o cálculo de um gradiente simpléctico em $\mathbb{R}^n$. Consideremos a menor bola (fechada), $\mathcal{B}(y^0; \Delta)$, centrada em y^0 , que contém o conjunto de amostragem, onde $\Delta = \max_{1 \leq i \leq q} \|y^i - y^0\|$.*

Seja $S = [y^1 - y^0 \ \dots \ y^q - y^0]$ e $U\Sigma V^\top$ uma decomposição em valores singulares (na sua forma reduzida) de $S^\top/\Delta$. Suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num aberto Ω contendo $\mathcal{B}(y^0; \Delta)$, com constante de Lipschitz $\gamma_{\nabla f} > 0$.

O erro do gradiente simpléctico de f , calculado em y^0 , como uma aproximação de $\nabla f(y^0)$, satisfaz

$$\|\hat{V}^\top [\nabla f(y^0) - \nabla_s f(y^0)]\| \leq \left(\sqrt{q} \frac{\gamma_{\nabla f}}{2} \|\Sigma^{-1}\| \right) \Delta, \quad (4.1)$$

onde $\hat{V} = I$, se $q \geq n$, e $\hat{V} = V$, se $q < n$.

Nota-se que a diferença do erro é projectada no espaço nulo de $S^\top/\Delta$. Se o número de pontos não for suficiente ($q < n$), então não há qualquer garantia de qualidade na aproximação (uma vez que $\hat{V} \neq I$). Ainda assim, os gradientes simplécticos subdeterminados contêm informação relevante que pode ser de utilidade, particularmente se o número de pontos do conjunto de amostragem for próximo de $n + 1$.

A noção de gradiente simpléctico pode ser generalizada de modo a permitir o cálculo de derivadas simplécticas de ordem mais elevada (ver Conn, Scheinberg e Vicente [23]). Em particular, para o cálculo de uma Hessiana simpléctica considera-se o sistema

$$(y^i - y^0)^\top g + \frac{1}{2}(y^i - y^0)^\top H(y^i - y^0) = f(y^i) - f(y^0), \quad i = 1, \dots, p, \quad (4.2)$$

onde $g \in \mathbb{R}^n$ e $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ são as variáveis e $H = H^\top$. Se se pretender determinar todas as componentes da matriz Hessiana, o conjunto de amostragem considerado deverá ter $p + 1 = (n + 1)(n + 2)/2$ pontos. No entanto, podem considerar-se versões indeterminadas deste sistema. À semelhança do que acontece no caso linear, o gradiente simpléctico $g = \nabla_s f(y^0)$ e a Hessiana simpléctica $H = \nabla_s^2 f(y^0)$ calculados a partir do sistema (4.2) coincidem com

os coeficientes do modelo quadrático de interpolação polinomial multivariada associado ao conjunto de amostragem considerado.

4.1.3 Aspectos geométricos do conjunto de amostragem

A qualidade do limite superior do erro, expresso no Teorema 4.1.1, depende do tamanho da constante $\sqrt{q} \frac{\gamma_{\nabla f}}{2} \|\Sigma^{-1}\|$. Por sua vez, esta constante depende, essencialmente, da suavidade inerente à função objectivo, expressa através da constante de Lipschitz $\gamma_{\nabla f}$, e de $\|\Sigma^{-1}\|$, que reflecte a geometria do conjunto de amostragem. Assim, por forma a controlar a qualidade dos gradientes simplécticos, é crucial monitorizar a geometria dos conjuntos de amostragem considerados, ou seja, o valor de $\|\Sigma^{-1}\|$.

Conn, Scheinberg e Vicente [26] introduziram a noção de equilíbrio- Λ (com $\Lambda > 0$) para medir a qualidade dos conjuntos de amostragem. Propuseram, ainda, algoritmos para construir ou manter conjuntos de pontos em equilíbrio- Λ . A noção de equilíbrio- Λ está fortemente relacionada com a interpolação polinomial baseada em polinómios de Lagrange (ver Conn, Scheinberg e Vicente [26, 23]). Se um conjunto de amostragem $\{y^0, y^1, \dots, y^q\}$ está em equilíbrio- Λ , então prova-se que $\|\Sigma^{-1}\|$ é limitada por um múltiplo de Λ . Reciprocamente, se $\|\Sigma^{-1}\|$ é limitada por uma constante Λ , então o conjunto de pontos está em equilíbrio- Λ .

4.2 Algoritmos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas

As derivadas simplécticas, e em particular os gradientes simplécticos, são utilizadas por Kelley *et al.* [15, 93] como direcções de procura nos algoritmos de filtro implícito. Um algoritmo de filtro implícito pode ser interpretado como um método de procura unidireccional que utiliza os gradientes simplécticos como aproximações dos verdadeiros gradientes. No cálculo destes gradientes, o incremento das diferenças é reduzido à medida que o algoritmo progride. De acordo com estes autores, a ideia subjacente é a de que um incremento grande torna o método insensível a oscilações de baixa amplitude, embora de frequência elevada na função objectivo. Desta forma, as oscilações serão *filtradas*, o que justifica a designação atribuída ao algoritmo. O algoritmo de filtro implícito pretende dar resposta a variações de maior amplitude na função objectivo e evitar gerar iteradas que se aproximem demasiado de minimizantes locais espúrios (ver a Figura 2.1).

Conn, Scheinberg e Vicente [24] propuseram um enquadramento algorítmico para o filtro implícito, sob o qual é garantida a convergência global para pontos estacionários de primeira ordem. A principal modificação passa pela forma como a utilização da estratégia de *backtracking*, usada para satisfazer uma condição de decréscimo suficiente, se relaciona com a

qualidade dos gradientes simplécticos. A descrição algorítmica da Subsecção 4.2.1 baseia-se neste enquadramento.

4.2.1 Descrição da classe de algoritmos

Na sua forma mais simples, um método de procura unidireccional baseado em derivadas simplécticas é um método de descida máxima que recorre a gradientes simplécticos. O algoritmo gera uma sucessão de iteradas, $\{x_k\}$, cuja correspondente sucessão dos valores da função objectivo, $\{f(x_k)\}$, é decrescente.

Em cada iteração, k , é construído um gradiente simpléctico a partir de um conjunto de pontos equilibrado, $\{x_k, y_k^1, \dots, y_k^q\}$, com $\Delta_k = \max_{1 \leq i \leq q} \|y_k^i - x_k\|$ e $q \geq n$. A direcção simétrica do gradiente simpléctico é explorada numa estratégia de *backtracking*, com vista a garantir uma redução suficiente no valor da função objectivo. A sucessão $\{\Delta_k\}$ deverá convergir para zero, garantindo-se a precisão dos gradientes simplécticos considerados (ver o Teorema 4.1.1).

No que se segue, supõe-se que um limite para o erro do gradiente simpléctico, enquanto aproximação do verdadeiro gradiente, semelhante ao expresso na condição (4.1), pode ser obtido num número finito de melhoramentos da geometria do conjunto de amostragem. Por um melhoramento de geometria entende-se a substituição de um ponto pertencente ao conjunto de amostragem.

Hipótese 4.2.1. *Para qualquer valor de $\Delta_k > 0$, a condição*

$$\|\nabla f(x_k) - \nabla_s f(x_k)\| \leq \kappa \Delta_k, \quad \kappa > 0 \quad (4.3)$$

pode ser satisfeita após um número finito de melhoramentos da geometria do conjunto de amostragem.

De acordo com o que foi referido na Subsecção 4.1.3, os algoritmos propostos em Conn, Scheinberg e Vicente [26] podem ser utilizados nestes melhoramentos de geometria. Para derivadas simplécticas de primeira ordem (gradientes simplécticos), os melhoramentos de geometria são relativamente elementares, podendo ser implementados das mais diversas formas.

Na ausência de informação sobre o gradiente, as condições clássicas de decréscimo suficiente (ver, por exemplo, Dennis e Schnabel [35] ou Nocedal e Wright [80]) são substituídas por uma condição de decréscimo suficiente baseada no gradiente simpléctico,

$$f(x_{k+1}) = f(x_k - \alpha \nabla_s f(x_k)) < f(x_k) - c\alpha \|\nabla_s f(x_k)\|^2, \quad (4.4)$$

com $0 < c < 1$. De uma forma geral, o novo ponto será do tipo $x_k - \alpha_k \nabla_s f(x_k)$, onde o valor de α_k é seleccionado usando uma estratégia de *backtracking*, de modo a satisfazer a condição (4.4). Contudo, o algoritmo é suficientemente flexível para aceitar um outro ponto como iterada corrente, desde que este permita reduzir o valor conhecido para a função objectivo.

A direcção simétrica do gradiente simpléctico pode não ser uma direcção de descida, pelo que a condição de decréscimo suficiente (4.4) pode não vir a ser satisfeita, por mais pequeno que seja o valor de α . Para evitar esta situação, o valor de Δ_k é reduzido, por comparação com o valor de $\|\nabla_s f(x_k)\|$, o que implica o melhoramento da geometria do conjunto de amostragem e o cálculo de um novo gradiente simpléctico. A procura unidireccional é retomada, usando o novo gradiente simpléctico, mas a partir da iterada corrente do algoritmo (que se mantém). A Figura 4.2 apresenta uma descrição esquemática do algoritmo, baseada no enquadramento proposto por Conn, Scheinberg e Vicente [24].

4.2.2 Análise de convergência global

Desde que x_k não seja um ponto estacionário, é sempre possível melhorar a geometria do conjunto de amostragem (num número finito de passos) de forma a determinar um gradiente simpléctico que verifique $\Delta_k \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)\|$, com $0 < \xi \leq 1$. A demonstração é retirada de Conn, Scheinberg e Toint [22].

Lema 4.2.1. *Seja f continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, com $\nabla f(x_k) \neq 0$. Suponhamos verdadeira a Hipótese 4.2.1 e consideremos $0 < \xi \leq 1$. Nestas condições, é finito o número de reduções de Δ_k e de tentativas de melhoramento da geometria do conjunto de amostragem utilizado no cálculo de um gradiente simpléctico, de forma a que $\Delta_k \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)\|$.*

Demonstração. Consideremos $\nu \in (0, 1)$ e $L > 0$. Seja $\nabla_s f(x_k)^{(0)} = \nabla_s f(x_k)$. Calculemos $\nabla_s f(x_k)^{(1)}$ de forma a que a condição (4.3) seja satisfeita com $\Delta_k = L\nu$ (o que, de acordo com a Hipótese 4.2.1, é possível num número finito de tentativas de melhoramento da geometria do conjunto de amostragem).

Se $\Delta_k = L\nu \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)^{(1)}\|$, então obtemos o resultado pretendido. Caso contrário, calculemos $\nabla_s f(x_k)^{(2)}$ de forma a que a condição (4.3) seja satisfeita com $\Delta_k = L\nu^2$ e repita-se o raciocínio, agora com $\Delta_k = L\nu \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)^{(1)}\|$ substituído por $\Delta_k = L\nu^2 \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)^{(2)}\|$. Este procedimento termina após um número finito de tentativas ou, então, tem-se que $\|\nabla f(x_k) - \nabla_s f(x_k)^{(i)}\| \leq \kappa L\nu^i$, com $\xi \|\nabla_s f(x_k)^{(i)}\| < L\nu^i$ para todo o $i > 0$. Conclui-se, ao tomar o limite quando i tende para $+\infty$, que $\nabla f(x_k) = 0$, o que contradiz as hipóteses do lema. $\square$

O próximo lema (ver Conn, Scheinberg e Vicente [24]) estabelece que a estratégia de

Algoritmo de Procura Unidireccional baseado em Gradientes Simpléticos

Inicialização

Escolher $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e um conjunto de amostragem equilibrado, $S_0 = \{x_0, y_0^1, \dots, y_0^q\}$, com $q \geq n$. Considerar $j_{max} \in \mathbb{N}$ e $0 < \beta, c < 1$. Fazer $k = 0$.

Cálculo de um gradiente simplético

Usando S_k , calcular um gradiente simplético $\nabla_s f(x_k)$ que satisfaça $\Delta_k \leq \|\nabla_s f(x_k)\|$, com $\Delta_k = \max_{1 \leq i \leq q} \|y_k^i - x_k\|$. Considerar $j_{actual} = j_{max}$ e $\xi = 1$.

Procura unidireccional

Para $j = 0, 1, \dots, j_{actual}$,

- Considerar $\alpha = \beta^j$. Avaliar f em $x_k - \alpha \nabla_s f(x_k)$.
- Se a condição de decréscimo suficiente

$$f(x_k - \alpha \nabla_s f(x_k)) < f(x_k) - c\alpha \|\nabla_s f(x_k)\|^2$$

se verifica, então terminar o passo de procura unidireccional e considerar $\alpha_k = \alpha$.

Insucesso da procura unidireccional

Se o passo de procura unidireccional foi mal sucedido, então dividir ξ por dois e recalculer um gradiente simplético $\nabla_s f(x_k)$ tal que $\Delta_k \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)\|$, eventualmente melhorando a geometria do conjunto de amostragem S_k . Considerar $j_{actual} = j_{actual} + 1$ e regressar ao passo de procura unidireccional.

Actualização da iterada corrente

Considerar $x_{k+1} \in \arg \min_{x \in \mathcal{X}_k} \{f(x_k - \alpha_k \nabla_s f(x_k)), f(x)\}$, onde $\mathcal{X}_k$ representa o conjunto de pontos em que f foi avaliada no decurso do cálculo dos gradientes simpléticos. Formar S_{k+1} a partir de S_k , retirando um ponto e acrescentando x_{k+1} . Incrementar k em uma unidade e regressar ao passo onde é calculado um gradiente simplético.

Figura 4.2: Um método de procura unidireccional baseado em gradientes simpléticos.

backtracking, usada para satisfazer a condição de decréscimo suficiente (4.4), está bem definida. A demonstração é omitida, sendo feita uma demonstração semelhante no Capítulo 7 (ver o Lema 7.5.1).

Lema 4.2.2. *Seja f uma função continuamente diferenciável para a qual o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz em $\mathbb{R}^n$ (com constante de Lipschitz $\gamma_{\nabla f} > 0$). Suponhamos verdadeira a Hipótese 4.2.1 e que $\nabla f(x_k) \neq 0$. A condição de decréscimo suficiente (4.4) é satisfeita para todos os α e c tais que*

$$0 < \alpha < \frac{2(1 - c - \kappa\xi)}{\gamma_{\nabla f}}$$

e

$$\xi < \frac{1 - c}{\kappa},$$

com κ a constante do erro em (4.3).

Os dois lemas anteriores permitem garantir que α_k é limitado inferiormente por

$$\alpha_k \geq \bar{\alpha} = \frac{2(1 - c - \kappa\bar{\xi})\beta}{\gamma_{\nabla f}}, \quad (4.5)$$

com $\bar{\xi}$ um qualquer número tal que

$$\bar{\xi} < \frac{1 - c}{\kappa}.$$

Este comportamento é relevante na demonstração da convergência global. Aliás, argumentos análogos aos usados em qualquer método de procura unidireccional baseado em derivadas permitem concluir, facilmente, que um método de procura unidireccional baseado em derivadas simpléticas gera uma sucessão de pontos para os quais o limite da correspondente sucessão de gradientes simpléticos da função objectivo converge para zero. Todos os gradientes simpléticos satisfazem a condição (4.3), o que permite provar, posteriormente, que a sucessão dos verdadeiros gradientes também converge para zero. A demonstração é incluída para esclarecer melhor este raciocínio.

Teorema 4.2.1. *Seja f uma função continuamente diferenciável para a qual o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz em $\mathbb{R}^n$. Sob as Hipóteses 3.2.1 e 4.2.1, um método de procura unidireccional baseado em gradientes simpléticos gera uma sucessão de iteradas, $\{x_k\}$, tal que*

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

Demonstração. Por hipótese, f é limitada inferiormente em $L(x_0)$. Por construção, a sucessão $\{f(x_k)\}$ é decrescente, logo a desigualdade (4.4) permite concluir que $\{\alpha_k \|\nabla_s f(x_k)\|^2\}$ converge para zero. A existência de um limite inferior estritamente positivo, $\bar{\alpha}$, para os comprimentos do passo, α_k , garante que $\{\|\nabla_s f(x_k)\|\}$ converge para zero.

Como $\Delta_k \leq \xi \|\nabla_s f(x_k)\|$, com $\xi \in (0, 1]$, a condição (4.3) permite-nos concluir que $\{\|\nabla f(x_k)\|\}$ converge para zero. $\square$

É possível generalizar os limites superiores para o erro nos gradientes simplécticos, resumidos no Teorema 4.1.1, a casos em que a função objectivo está sujeita a um determinado nível de ruído, o que justifica a aplicação dos métodos de procura unidireccional baseados em derivadas simplécticas a este tipo de funções.

4.2.3 O algoritmo de filtro implícito

Na versão da procura unidireccional baseada em derivadas simplécticas proposta no algoritmo de filtro implícito (ver Winslow, Trew, Gilmore e Kelley [93], Bortz e Kelley [15] e Kelley [57]), o conjunto de amostragem não é actualizado (em cada iteração) a partir do anterior. Em alternativa, no início de cada iteração, é seleccionado um novo conjunto de amostragem.

Por outro lado, não é considerada qualquer estratégia que relacione a qualidade dos gradientes simplécticos, e dos conjuntos de amostragem considerados, com a procura unidireccional, pelo que é necessário impor limites que garantam o fim da execução do passo de procura unidireccional do algoritmo. Assim, no algoritmo de filtro implícito, o passo de procura unidireccional termina quando a condição de decréscimo suficiente é satisfeita ou quando se excede um número máximo, j_{max} , de passos de *backtrack*. O valor de j_{max} é constante em todas as iterações.

Nas versões do algoritmo propostas por Bortz e Kelley [15] e Choi e Kelley [17] considera-se sempre o mesmo tipo de conjuntos equilibrados na construção dos gradientes simplécticos, nomeadamente $S_k = h_k I$, onde I representa a matriz identidade. Em ambas as situações, $\{h_k\}$ é denominada uma sucessão de escalas e impõe-se a sua convergência para zero. Desta forma, é garantida a qualidade dos gradientes simplécticos como aproximações aos verdadeiros gradientes.

Outra característica importante do algoritmo de filtro implícito é a utilização de direcções de quasi-Newton simplécticas, da forma $-H_k^{-1} \nabla_s f(x_k)$. A actualização de H_k é reposta com o valor inicial ($H_{k+1} = H_0$) sempre que o passo de procura unidireccional não permita satisfazer a condição de decréscimo suficiente. Esta condição, por seu lado, toma a forma

$$f(x_{k+1}) = f(x_k + \alpha d) < f(x_k) + c\alpha \nabla_s f(x_k)^\top d,$$

com $c > 0$ e $d = -H_k^{-1} \nabla_s f(x_k)$ uma direcção de quasi-Newton simpléctica.

Capítulo 5

Utilização de gradientes simplécticos em procura directa direccional

De acordo com o que foi referido na Secção 2.5, uma das características dos métodos de procura directa direccional é a ‘convergência’ lenta para pontos estacionários. O presente capítulo baseia-se nos trabalhos de Custódio e Vicente [31, 30] e visa propor um conjunto de estratégias com o objectivo de melhorar a eficiência dos algoritmos pertencentes a esta classe. As estratégias propostas não implicam qualquer custo adicional em termos de cálculos da função objectivo. Não são feitas quaisquer hipóteses sobre a estrutura da função, pelo que as estratégias propostas podem ser aplicadas a quaisquer funções (em particular, às provenientes de simulações computacionais).

As derivadas simplécticas, cujas definições e propriedades foram descritas no Capítulo 4, são utilizadas na Secção 5.1 para construir *indicadores de descida simplécticos*. Posteriormente, estes indicadores são utilizados para ordenar as direcções a explorar no passo de sondagem dos algoritmos, de acordo com a estratégia descrita na Secção 5.2, embora possam ter outras utilizações (ver a Secção 5.3). A validação do uso destas estratégias, no contexto dos métodos de procura directa direccional, constitui a Secção 5.4. A Secção 5.5 estuda as propriedades dos gradientes simplécticos como ϵ -aproximações às *componentes grandes* do verdadeiro gradiente (de acordo com a definição de ϵ -aproximação sugerida por Abramson, Audet e Dennis [4]). Os resultados numéricos obtidos com uma implementação computacional das diferentes estratégias são reportados na Secção 5.6.

5.1 Indicadores de descida simplécticos

Em cada iteração de um algoritmo de procura directa direccional, a função objectivo é avaliada num conjunto finito de pontos. Alguns destes pontos podem ser armazenados, em conjunto com os correspondentes valores para a função objectivo, permitindo o cálculo de

derivadas simplécticas, que, por sua vez, podem ser utilizadas para melhorar a eficiência das iterações do algoritmo.

No início de cada iteração, podemos tentar identificar um subconjunto, do conjunto de pontos armazenado, com boas propriedades geométricas. Tendo como objectivo a construção de indicadores de descida baseados em derivadas simplécticas e de acordo com o que foi dito na Subsecção 4.1.3, um conjunto de pontos com boa geometria traduz-se num conjunto de pontos em equilíbrio- Λ , com $\Lambda > 0$ de valor moderado. Se formos bem sucedidos na identificação deste subconjunto, então podemos calcular uma forma de derivadas simplécticas, recorrendo às equações das Subsecções 4.1.1 ou 4.1.2. O tipo de derivada simpléctica a calcular dependerá, em particular, da cardinalidade do subconjunto identificado.

Estas derivadas simplécticas serão utilizadas na construção de um *indicador de descida simpléctico*, ι_k , que, por exemplo, poderá ser a direcção simétrica do gradiente simpléctico, $\iota_k = -\nabla_s f(x_k)$, representando uma potencial direcção de descida máxima. Designamos esta variante por **sgradiente**. Outra possibilidade consiste em calcular uma direcção de Newton simpléctica, $\iota_k = -H_k^{-1}g_k$, onde H_k aproxima uma Hessiana simpléctica e g_k representa um gradiente simpléctico. Esta abordagem é designada por **shessiana**.

Podem existir algumas iterações, em particular no início do processo de optimização, quando dispomos de um número reduzido de pontos onde a função objectivo foi avaliada, em que não é possível calcular um indicador de descida. Contudo, tal não se traduz em qualquer incremento no número de cálculos da função.

A classe dos algoritmos de procura directa direcciona, descrita na Figura 3.1, é adaptada na Figura 5.1 de modo a incorporar as estratégias baseadas em indicadores de descida simplécticos. Os procedimentos **[procura]**, **[ordem]** e **[passo]** são especificados fora da descrição do algoritmo base, permitindo uma fácil incorporação de quaisquer outras estratégias consideradas como uma mais valia no aumento da eficiência do algoritmo.

O algoritmo mantém uma lista de pontos, X_k , com tamanho máximo, p_{max} , para os quais se avaliou a função objectivo. Em cada novo cálculo da função, o algoritmo chama o procedimento **[guarda]**, que controla a inclusão (ou exclusão) de pontos na lista X_k .

No início de cada iteração, é considerado um novo passo em que é feito o cálculo das derivadas simplécticas. O algoritmo começa por tentar identificar um subconjunto Y_k , da lista X_k , com tamanho adequado e boa geometria. A distância dos pontos de Y_k à iterada corrente, x_k , não deve exceder Δ_k , com:

$$\Delta_k = \sigma_k \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|. \quad (5.1)$$

Neste caso, D_{k-1} representa o conjunto gerador positivo utilizado na iteração $k-1$ e $\sigma_k \in [1, \sigma_{max}]$, com $\sigma_{max} \geq 1$ constante em todas as iterações. A escolha de Δ_k é feita de forma

a garantir que $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$ contém todos os pontos do conjunto de sondagem $V_{k-1} = \{x_{k-1} + \alpha_{k-1}d : d \in D_{k-1}\}$, quando $k - 1$ é uma iteração sem sucesso. A dependência de Δ_k de α_{k-1} garante, de acordo com o Teorema 4.1.1 e para funções continuamente diferenciáveis, a qualidade das derivadas simplécticas calculadas numa subsucessão de iteradas sem sucesso geradas pelo algoritmo.

Como critério para armazenar um ponto, para o qual a função objectivo foi avaliada, consideram-se duas estratégias simples:

- **guarda-sucesso:** são guardadas apenas as iteradas, x_k , correspondentes a sucessos (para as quais $f(x_k) < f(x_{k-1})$);
- **guarda-todos:** é guardado qualquer ponto para o qual se avalie a função objectivo.

Independentemente da estratégia seleccionada, a inclusão dos pontos em X_k é feita de forma sequencial, adicionando cada novo ponto ao topo da lista. Quando **guarda-sucesso** é seleccionada, a lista está ordenada por ordem crescente dos valores da função. Se X_k atingiu o tamanho máximo permitido, p_{max} , é necessário remover um ponto antes de adicionar um outro. A remoção dos pontos é feita no fim da lista, preservando a informação mais recente. Qualquer uma das duas variantes armazena as iteradas com sucesso. É óbvio que a iterada corrente, x_k , está em X_k , quando a opção **guarda-sucesso** é seleccionada. Contudo, se a opção for **guarda-todos** e ocorrer um elevado número de iterações sem sucesso consecutivas, o ponto x_k pode ser removido da lista. Esta situação é evitada na implementação computacional do algoritmo, cujos resultados são reportados na Secção 5.6.

5.2 Ordenação das direcções de sondagem

A principal função dos indicadores de descida simplécticos, mencionados na Secção 5.1, é a ordenação das direcções do conjunto gerador positivo a explorar no passo de sondagem.

A generalidade dos algoritmos de procura directa direccionada não estabelece nenhuma ordenação para os vectores a testar neste passo. No relatório técnico [63], Lewis e Torczon propõem duas classes distintas de algoritmos de procura em padrão, nomeadamente a procura em padrão baseada em bases positivas e a procura em padrão baseada numa ordenação relativa. No contexto da procura em padrão baseada em ordenação relativa, é sugerida uma ordenação do conjunto de pontos correspondentes a uma iteração sem sucesso, mas apenas com o objectivo de identificar o melhor e o pior ponto do conjunto. Estes dois pontos são utilizados para determinar uma aproximação grosseira da direcção de descida máxima. Os autores afirmam, explicitamente, que não é seu objectivo ordenar os restantes elementos do conjunto. Audet e Dennis [11] propuseram uma **ordem-dinâmica** do conjunto de sondagem,

Algoritmo de Procura Directa Direccional — Utilizando Indicadores de Descida Simpléticos

Inicialização

Escolher $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x_0) < +\infty$ e $\alpha_0 > 0$. Seleccionar todas as constantes necessárias aos procedimentos [procura], [ordem] e [passo]. Fazer $k = 0$. Considerar $X_0 = [x_0]$, inicializando a lista de pontos gerida por [guarda]. Definir o número máximo de pontos, p_{max} , que podem ser armazenados. Definir ainda o número mínimo, s_{min} , e máximo, s_{max} , de pontos envolvidos no cálculo de qualquer derivada simplética ($2 \leq s_{min} \leq s_{max}$). Fixar $\Lambda > 0$ e $\sigma_{max} \geq 1$.

Identificação de um conjunto em equilíbrio- Λ e cálculo de um indicador de descida simplético

Se não existe um número de pontos suficiente, i.e., se $|X_k| < s_{min}$, então não executar este passo. Considerar $\Delta_k = \sigma_k \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|$, com $\sigma_k \in [1, \sigma_{max}]$. Tentar identificar um subconjunto Y_k de $X_k \cap \mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$, com um número máximo de pontos (sem exceder s_{max}), tal que Y_k está em equilíbrio- Λ e inclui a iterada corrente x_k . Se $|Y_k| \geq s_{min}$, então calcular uma forma de derivadas simpléticas, usando o conjunto Y_k , e a partir destas calcular um indicador de descida simplético, ι_k .

Passo de Procura

Chamar [procura] com o objectivo de identificar um ponto x que satisfaça $f(x) < f(x_k)$, avaliando a função apenas num número finito de pontos. Chamar [guarda] em cada novo cálculo da função. Se foi possível encontrar um ponto nas condições referidas, então $x_{k+1} = x$, a iteração é declarada como bem sucedida e o passo de sondagem não é executado.

Passo de Sondagem

Escolher um conjunto gerador positivo D_k para $\mathbb{R}^n$ e chamar [ordem] para o ordenar. Avaliar a função objectivo no conjunto de sondagem $V_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\}$, seguindo a ordem determinada e chamando [guarda] em cada novo cálculo. Logo que se encontre um ponto de sondagem $x_k + \alpha_k d_k \in V_k$ tal que $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$, parar a sondagem, considerar $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e declarar a iteração como bem sucedida. Caso contrário, declarar a iteração como um insucesso e considerar $x_{k+1} = x_k$.

Actualização do comprimento do passo

Chamar [passo] para calcular α_{k+1} . Incrementar k em uma unidade e regressar ao passo do indicador de descida simplético.

Figura 5.1: A classe dos métodos de procura directa direccional, adaptada para identificar conjuntos em equilíbrio- Λ e utilizar indicadores de descida simpléticos.

Procedimento ordem-ds

Calcular $\cos(\iota_k, d)$ para todo o $d \in D_k$. Ordenar as colunas de D_k por ordem decrescente do valor dos cosenos correspondentes.

Figura 5.2: Ordenação das direcções de sondagem, de acordo com os ângulos que fazem com o indicador de descida simpléctico.

considerando a direcção de sondagem associada à iteração com sucesso mais recente como a primeira direcção a explorar no passo de sondagem da iteração seguinte.

Tendo disponível um indicador de descida simpléctico, as direcções de sondagem podem ser ordenadas por ordem crescente dos ângulos que formam com este indicador. Assim, o primeiro ponto a ser avaliado será o correspondente à direcção de sondagem que faz o ângulo de menor amplitude com o indicador de descida. A Figura 5.3 ilustra este procedimento, que é formalizado na Figura 5.2.

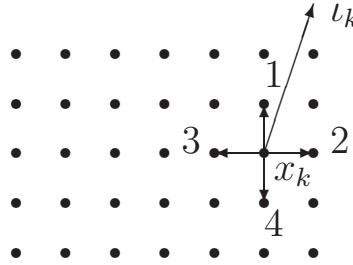


Figura 5.3: Ordenação das direcções de sondagem, recorrendo a um indicador de descida simpléctico. O conjunto gerador positivo considerado é $D_k = [I - I]$.

5.3 Outras utilizações dos indicadores de descida simplécticos

A informação disponível nas derivadas simplécticas pode ter outras utilizações, para além da ordenação das direcções de sondagem. Em particular, pode permitir definir um passo de procura ou uma estratégia para a actualização do comprimento do passo.

Existem várias possibilidades de definir um passo de procura baseado em derivadas simplécticas. Por exemplo, podemos considerar um modelo sub-rogado, $m_k(y)$, baseado em alguma forma de derivadas simplécticas, calculadas usando o conjunto Y_k , e minimizar este modelo em $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$. No caso de utilizarmos uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais, o minimizante encontrado será posteriormente projectado na grelha M_k .

Como modelo sub-rogado grosseiro podemos considerar um modelo linear, baseado somente no indicador de descida, $m_k(y) = f(x_k) - \iota_k^\top (y - x_k)$. Este procedimento é ilustrado na Figura 5.4 e sistematizado na Figura 5.5. Uma escolha natural para ι_k é $-\nabla_s f(x_k)$, mas podem ser considerados outros indicadores de descida simplécticos, como por exemplo $\iota_k = -H_k^{-1} g_k$, onde g_k é um gradiente simpléctico e H_k aproxima uma Hessiana simpléctica.

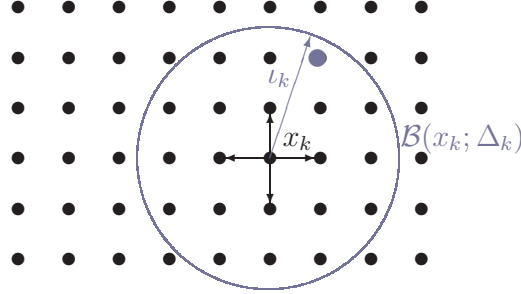


Figura 5.4: Definição de um passo de procura simples, baseado num indicador de descida simpléctico. O ponto a testar é representado pelo círculo azul. O conjunto gerador positivo considerado é $D_k = [I \ -I]$.

A forma mais comum de actualizar o comprimento do passo, num método de procura directa direcciona, consiste em reduzir o seu valor a metade, em iterações sem sucesso, e duplicá-lo, em iterações bem sucedidas. Duplicar o comprimento do passo em todas as iterações com sucesso pode resultar, posteriormente, num número excessivo de contracções, cada uma das quais exigindo a avaliação da função objectivo num conjunto de sondagem completo, o que se traduz num aumento do total de cálculos da função. De modo a evitar este tipo de comportamento, Hough, Kolda e Torczon [56] propuseram que o comprimento do passo seja sempre mantido em iterações com sucesso, excepto quando ocorrem duas iterações bem sucedidas consecutivas usando a mesma direcção. Neste último caso, é sugerido duplicar o comprimento do passo. Esta estratégia, designada por **passo-HKT**, enquadra-se no procedimento descrito na Figura 3.2 para a actualização do comprimento do passo num contexto de grelhas racionais.

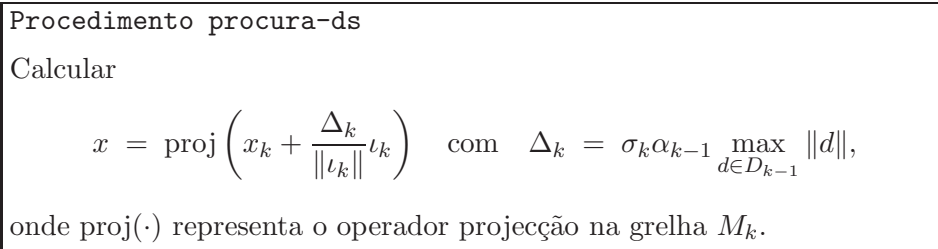


Figura 5.5: Um passo de procura simples, baseado num indicador de descida simpléctico.

Procedimento passo-ds

Na iteração $k = 0$ de um algoritmo de procura em padrão, consideremos $\tau \in \mathbb{Q}$ com $\tau > 1$, $j_{max} \in \mathbb{N}_0$ e $j_{min} \in \mathbb{Z}^-$. Os expoentes devem satisfazer $j_k^+ \in \{0, 1, 2, \dots, j_{max}\}$ e $j_k^- \in \{j_{min}, \dots, -2, -1\}$. Consideremos ainda $\eta > 0$.

Se a iteração foi bem sucedida, então calcular

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{m_k(x_k) - m_k(x_{k+1})}.$$

Se $\rho_k > \eta$ então $\alpha_{k+1} = \tau^{j_k^+} \alpha_k$.

Se $\rho_k \leq \eta$ então $\alpha_{k+1} = \alpha_k$.

Se a iteração foi mal sucedida, então contrair a grelha, reduzindo o comprimento do passo $\alpha_{k+1} = \tau^{j_k^-} \alpha_k$.

Figura 5.6: Actualização do comprimento do passo exigindo decréscimo suficiente, mas gerando grelhas racionais.

No caso linear, quando um gradiente simpléctico $\nabla_s f(x_k)$ é calculado, o modelo $m_k(y) = f(x_k) + \nabla_s f(x_k)^\top (y - x_k)$ também pode ser utilizado numa estratégia de actualização do comprimento do passo. Para o efeito, considera-se

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{m_k(x_k) - m_k(x_{k+1})} = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{-\nabla_s f(x_k)^\top (x_{k+1} - x_k)}.$$

Se x_{k+1} for calculado num passo de sondagem bem sucedido, então $x_{k+1} - x_k = \alpha_k d_k$ para algum $d_k \in D_k$. No caso quadrático, o modelo é substituído por $m_k(y) = f(x_k) + g_k^\top (y - x_k) + (1/2)(y - x_k)^\top H_k (y - x_k)$. Este procedimento é designado por **passo-ds** e encontra-se descrito na Figura 5.6, onde o decréscimo suficiente é apenas exigido em iterações com sucesso.

Dado que os factores de expansão e contracção são potências inteiras de τ e como as regras de contracção respeitam o procedimento descrito na Figura 3.2, a modificação introduzida em **passo-ds** não afecta as propriedades de convergência global da procura directa direcciona.

5.4 Validação das estratégias propostas no contexto da procura directa direcciona

Nas Secções 5.2 e 5.3 foram sugeridas várias estratégias, baseadas em indicadores de descida simplécticos, para melhorar a eficiência de um método de procura directa direcciona. Para garantir que as estratégias propostas são viáveis num contexto de optimização com recurso

a algoritmos pertencentes a esta classe de métodos e que não conduzem a qualquer aumento no número de cálculos da função objectivo, torna-se necessário mostrar que é possível a construção de indicadores de descida, recorrendo apenas aos pontos em que a função é avaliada no decurso do processo de optimização.

Quando se utiliza uma variante **guarda-todos** na construção da lista X_k , então, após uma iteração sem sucesso, é possível garantir a qualidade de um conjunto de amostragem, Y_k , usado na construção de derivadas simplécticas. Este resultado é formalizado no Teorema 5.4.1.

Para este efeito, consideremos o cálculo de um gradiente simpléctico e suponhamos que usamos uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais. Definamos

$$s_{gp} = \min\{|D_k| : D_k \subset D, D_k \text{ conjunto gerador positivo}\}.$$

Suponhamos que $s_{min} \leq s_{gp}$, ou seja, que os gradientes simplécticos podem ser calculados usando s_{gp} pontos pertencentes a X_k , desde que com geometria adequada.

Se a iteração $k - 1$ foi mal sucedida, então foram adicionados à lista X_{k-1} pelo menos $|D_{k-1}|$ pontos (os pontos correspondentes ao passo de sondagem $x_{k-1} + \alpha_{k-1}d$, para todo $d \in D_{k-1}$). Estes pontos pertencem a X_k , tal como a iterada corrente $x_k = x_{k-1}$. O teorema seguinte mostra que o conjunto de amostragem $Y_k = \{x_k\} \cup \{x_{k-1} + \alpha_{k-1}d : d \in D_{k-1}\} \subset X_k$ está em equilíbrio- Λ para o cálculo de um gradiente simpléctico. O resultado mostra, ainda, que o conjunto $Y_k \subset X_k$ constituído por x_k e por apenas $|D_{k-1}| - 1$ elementos $x_{k-1} + \alpha_{k-1}d$, $d \in D_{k-1}$, também está em equilíbrio- Λ para o cálculo de um gradiente simpléctico. Neste último caso, considera-se $s_{min} \leq s_{gp} - 1$.

Teorema 5.4.1. *Seja $k - 1$ uma qualquer iteração sem sucesso de um método de procura directa direcciona, que se enquadre na descrição da Figura 5.1. Suponhamos que é usada uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais e que a lista de pontos X_k é construída numa variante **guarda-todos**.*

- *Se $s_{min} \leq s_{gp}$, então existe uma constante positiva Λ_1 (independente de k) tal que o conjunto de amostragem $Y_k \subset X_k$ constituído por $x_k = x_{k-1}$ e pelos pontos $x_{k-1} + \alpha_{k-1}d$, $d \in D_{k-1}$ está em equilíbrio- Λ_1 para o cálculo (sobredeterminado) de um gradiente simpléctico.*
- *Se $s_{min} \leq s_{gp} - 1$, então existe uma constante positiva Λ_2 (independente de k) tal que o conjunto de amostragem $Y_k \subset X_k$ constituído por $x_k = x_{k-1}$ e por apenas $|D_{k-1}| - 1$ dos pontos $x_{k-1} + \alpha_{k-1}d$, $d \in D_{k-1}$ está em equilíbrio- Λ_2 para o cálculo (determinado ou sobredeterminado) de um gradiente simpléctico.*

Demonstração. Para estabelecer o primeiro resultado, consideremos $Y_k = \{y_k^0, y_k^1, \dots, y_k^{q_k}\}$ com $q_k + 1 = |Y_k| = |D_{k-1}| + 1$ e $y_k^0 = x_k$. Então,

$$S_k = [y_k^1 - x_k \ \cdots \ y_k^{q_k} - x_k] = [\alpha_{k-1}d_1 \ \cdots \ \alpha_{k-1}d_{|D_{k-1}|}] = \alpha_{k-1}D_{k-1}.$$

A matriz D_{k-1} tem característica n , uma vez que por definição gera linearmente $\mathbb{R}^n$. Daqui resulta que

$$\frac{1}{\Delta_k} S_k = \frac{\alpha_{k-1}}{\sigma_k \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|} D_{k-1} = \frac{1}{\sigma_k} \frac{1}{\max_{d \in D_{k-1}} \|d\|} D_{k-1},$$

pelo que a constante geométrica associada a este conjunto de amostragem Y_k é dada por

$$\frac{1}{\sigma_k} \|\Sigma^{-1}\| \quad \text{com} \quad \frac{1}{\max_{d \in D_{k-1}} \|d\|} D_{k-1}^\top = U \Sigma V^\top.$$

Como $\sigma_k \geq 1$, se escolhermos a constante de equilíbrio de forma a que

$$\Lambda_1 \geq \max \{ \|\Sigma^{-1}\| : \frac{1}{\max_{d \in D_{k-1}} \|d\|} D_{k-1}^\top = U \Sigma V^\top, \\ \forall \text{ conjunto gerador positivo } D_{k-1} \subset D \},$$

temos a garantia de identificar um conjunto em equilíbrio- Λ_1 , após uma iteração sem sucesso.

No segundo caso, seja $q_k + 1 = |Y_k| = |D_{k-1}|$ e

$$S_k = \alpha_{k-1} D_{|D_{k-1}|-1},$$

onde $D_{|D_{k-1}|-1}$ representa uma submatriz de D_{k-1} formada por $|D_{k-1}| - 1$ das suas colunas. Como D_{k-1} é um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$, o Corolário 3.1.1 garante que $D_{|D_{k-1}|-1}$ gera linearmente $\mathbb{R}^n$, pelo que a matriz tem característica n . Agora, a diferença reside no facto de termos de considerar todas as submatrizes $D_{|D_{k-1}|-1}$ de D_{k-1} . Assim, se escolhermos a constante de equilíbrio- Λ de modo a que

$$\Lambda_2 \geq \max \{ \|\Sigma^{-1}\| : \frac{1}{\max_{d \in D_{k-1}} \|d\|} D_{|D_{k-1}|-1}^\top = U \Sigma V^\top, \\ \forall D_{|D_{k-1}|-1} \subset D_{k-1}, \forall \text{ conjunto gerador positivo } D_{k-1} \subset D \},$$

temos a garantia de identificar um conjunto de amostragem em equilíbrio- Λ_2 , após cada iteração mal sucedida. $\square$

Nota-se que um resultado deste tipo não está necessariamente restrito a iterações sem sucesso. Outras configurações geométricas podem ser exploradas em iterações bem sucedidas.

O resultado estabelecido na Proposição 5.4.1, descrita de seguida, vai um pouco além,

ao afirmar que se a medida do coseno de um conjunto gerador positivo é superior a uma constante positiva ($\kappa(D) > \kappa_{\min} > 0$), então o conjunto de sondagem correspondente está em equilíbrio- Λ , com $\Lambda \equiv 1/(d_{\min}\kappa_{\min})$.

Proposição 5.4.1. *Seja D um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$. Suponhamos que $\|d\| \geq d_{\min} > 0$ para todo o $d \in D$. Então D tem característica completa e*

$$\|\Sigma^{-1}\| \leq \frac{1}{d_{\min}\kappa(D)},$$

em que $D^\top = U\Sigma V^\top$.

Demonstração. Como $\|d\| \geq d_{\min}$, para todo o $d \in D$, vem que

$$\begin{aligned} \kappa(D) &= \min_{\|v\|=1} \max_{d \in D} \frac{v^\top d}{\|d\|} \\ &\leq \frac{1}{d_{\min}} \min_{\|v\|=1} \max_{d \in D} |v^\top d| = \frac{1}{d_{\min}} \min_{\|v\|=1} \|D^\top v\|_\infty \\ &\leq \frac{1}{d_{\min}} \min_{\|v\|=1} \|D^\top v\|. \end{aligned}$$

As desigualdades de Courant-Fischer aplicadas a valores singulares (ver, por exemplo, o Teorema 3.1.2 em Horn e Johnson [55]) permitem-nos concluir que

$$\kappa(D) \leq \frac{1}{d_{\min}} \min_{\|v\|=1} \|D^\top v\| = \frac{1}{d_{\min}\|\Sigma^{-1}\|}.$$

□

5.5 Poda das direcções de sondagem

Abramson, Audet e Dennis [4] mostraram que, para uma escolha particular do conjunto gerador positivo D , aproximações, ainda que grosseiras, do gradiente da função objectivo podem ser usadas para reduzir o passo de sondagem a uma única avaliação. Estas aproximações foram designadas por ϵ -aproximações às componentes grandes do vector gradiente.

Seja g um vector não nulo de $\mathbb{R}^n$ e $\epsilon \geq 0$. Consideremos

$$J^\epsilon(g) = \{i \in \{1, \dots, n\} : |g_i| + \epsilon \geq \|g\|_\infty\}. \quad (5.2)$$

O vector g designa-se por uma ϵ -aproximação às componentes grandes de um vector não nulo $v \in \mathbb{R}^n$ se, sempre que $|v_i| = \|v\|_\infty$, se tiver que $i \in J^\epsilon(g)$ e $\text{sign}(g_i) = \text{sign}(v_i)$.

A relevância destas ϵ -aproximações, no contexto da procura em padrão, encontra-se expressa no Teorema 4 da referência [4]. Neste teorema mostra-se que uma ϵ -aproximação às componentes grandes do vector gradiente permite ‘podar’ o conjunto de direcções de sondagem, deixando uma única direcção onde é necessário calcular o valor da função objectivo. Para este efeito, consideremos o conjunto gerador positivo dado por $D = \{-1, 0, 1\}^n$ (todos os vectores não nulos de dimensão n , cujas componentes são -1 , 0 ou 1). Seja g_k uma ϵ -aproximação às componentes grandes de $-\nabla f(x_k)$ e considere-se $d^\epsilon(g_k) \in D$, com componentes

$$d^\epsilon(g_k)_i = \begin{cases} \text{sinal}(g_{ki}), & \text{se } i \in J^\epsilon(g_k), \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Considere-se, ainda, os conjuntos geradores positivos

$$D_k = \{d^\epsilon(g_k)\} \cup \mathbb{A}(-\nabla f(x_k)) \subset D,$$

onde

$$\mathbb{A}(-\nabla f(x_k)) = \{d \in D : -\nabla f(x_k)^\top d < 0\}$$

representa o subconjunto de direcções ascendentes em D . Foi provado em [4] que $d^\epsilon(g_k)$ é o único vector d em D_k tal que $-\nabla f(x_k)^\top d \geq 0$. Logo, num passo de sondagem baseado em D_k , basta avaliar a função objectivo recorrendo a $d^\epsilon(g_k)$.

A questão que se nos coloca consiste em saber em que condições é que um indicador de descida simpléctico, ι_k , e, em particular, a direcção simétrica de um gradiente simpléctico, $-\nabla_s f(x_k)$, é uma ϵ -aproximação às componentes grandes de $-\nabla f(x_k)$, para algum $\epsilon > 0$. O próximo teorema estabelece que tal acontece para valores de comprimento do passo, α_k , suficientemente pequenos. A viabilidade desta hipótese será discutida no final da presente secção.

Teorema 5.5.1. *Seja Y_k um conjunto de amostragem em equilíbrio- Λ (para o cálculo de um gradiente simpléctico), identificado na iteração k de um método de procura directa direccional, com $q_k + 1 \geq n + 1$ pontos.*

Suponhamos que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz, com constante de Lipschitz $\gamma_{\nabla f} > 0$, num domínio aberto Ω que contém $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$.

Então, se

$$\alpha_k \leq \frac{\|\nabla f(x_k)\|_\infty}{\sqrt{q_k} \gamma_{\nabla f} \Lambda \sigma_{\max} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|}, \quad (5.4)$$

a direcção simétrica do gradiente simpléctico $-\nabla_s f(x_k)$ é uma ϵ_k -aproximação às compo-

mentes grandes de $-\nabla f(x_k)$, com

$$\epsilon_k = \left(\sqrt{q_k} \gamma_{\nabla f} \Lambda \sigma_{max} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\| \right) \alpha_k.$$

Demonstração. Seja i pertencente ao conjunto de índices

$$I_k = \{i \in \{1, \dots, n\} : |\nabla f(x_k)_i| = \|\nabla f(x_k)\|_\infty\}.$$

Recorrendo ao Teorema 4.1.1, obtemos

$$\begin{aligned} \|\nabla_s f(x_k)\|_\infty &\leq \|\nabla f(x_k) - \nabla_s f(x_k)\|_\infty + |\nabla f(x_k)_i| \\ &\leq \|\nabla f(x_k) - \nabla_s f(x_k)\|_\infty + |\nabla f(x_k)_i - \nabla_s f(x_k)_i| + |\nabla_s f(x_k)_i| \\ &\leq 2\|\nabla f(x_k) - \nabla_s f(x_k)\| + |\nabla_s f(x_k)_i| \\ &\leq \sqrt{q_k} \gamma_{\nabla f} \Lambda \Delta_k + |\nabla_s f(x_k)_i| \\ &\leq \epsilon_k + |\nabla_s f(x_k)_i|. \end{aligned}$$

Provámos, assim, que i está em $J^\epsilon(\nabla_s f(x_k))$ (ver (5.2)).

Apelando novamente ao Teorema 4.1.1 vem que

$$-\nabla_s f(x_k)_i = -\nabla f(x_k)_i + \xi_{k,i}, \quad \text{onde} \quad |\xi_{k,i}| \leq \sqrt{q_k} \frac{\gamma_{\nabla f}}{2} \Lambda \Delta_k.$$

Se $-\nabla f(x_k)_i$ e $\xi_{k,i}$ concordam em sinal, então o mesmo sucede com $-\nabla f(x_k)_i$ e $-\nabla_s f(x_k)_i$. Caso contrário, os sinais serão coincidentes desde que

$$|\xi_{k,i}| \leq \sqrt{q_k} \frac{\gamma_{\nabla f}}{2} \Lambda \Delta_k \leq \frac{1}{2} \|\nabla f(x_k)\|_\infty = \frac{1}{2} |\nabla f(x_k)_i|.$$

A demonstração conclui-se usando a expressão (5.1), que define Δ_k , e o limite superior para α_k considerado nas hipóteses do teorema. $\square$

Ao considerar as hipóteses do Teorema 5.5.1, concluimos que a direcção simétrica do gradiente simpléctico $-\nabla_s f(x_k)$ permite podar o conjunto de sondagem,

$$D_k = \{d^{\epsilon_k}(-\nabla_s f(x_k))\} \cup \mathbb{A}(-\nabla f(x_k)),$$

obtendo-se uma única direcção, mais concretamente o vector $d^{\epsilon_k}(-\nabla_s f(x_k))$, onde ϵ_k é dado no Teorema 5.5.1.

Analiseemos, em detalhe, a viabilidade da condição (5.4). Não existe qualquer garantia de que esta condição em α_k possa ser satisfeita assintoticamente. A condição (5.4) proporciona

apenas uma indicação do efeito de poda da direcção simétrica do gradiente simpléctico, existindo uma maior possibilidade de ser satisfeita em pontos para os quais o valor da norma do gradiente é relativamente grande. O que se conhece sobre esta matéria é uma condição que estabelece que α_k ‘domina’ $\|\nabla f(x_k)\|$ em iterações mal sucedidas:

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \left(\gamma_{\nabla f} \kappa(D_k)^{-1} \max_{d \in D_k} \|d\| \right) \alpha_k,$$

onde $\kappa(D_k)$ representa a medida do coseno do conjunto gerador positivo D_k (ver Teorema 3.2.3). O uso de uma estratégia de globalização garante que $\{\kappa(D_k)^{-1}\}$ é limitada, pelo que, em iterações sem sucesso, a norma do gradiente é majorada por um múltiplo de α_k . No entanto, Dolan, Lewis e Torczon [38] reportaram resultados computacionais em que α_k tendeu para zero mais rapidamente do que $\|\nabla f(x_k)\|$. A nossa experiência computacional aponta no mesmo sentido. Contudo, é difícil verificar, de forma precisa, se a condição (5.4) é satisfeita, dada a sua dependência da constante de Lipschitz de ∇f . Um estudo numérico deste comportamento assintótico poderá constituir uma linha futura de investigação.

5.6 Resultados computacionais

Como base de comparação numérica para as diferentes estratégias propostas, foi implementado um algoritmo de procura directa direccional com uma estratégia de globalização baseada em grelhas racionais (ver Figuras 3.1 e 3.2). Para este termo de comparação, não foi considerado qualquer passo de procura, o comprimento do passo foi mantido em todas as iterações com sucesso e a ordem das direcções dos conjuntos de sondagem não foi alterada no decurso das iterações do algoritmo. Designamos esta versão por **base**.

Foram testadas várias versões de algoritmos de procura directa direccional que se enquadram na descrição da Figura 5.1. As estratégias **ordem-ds**, **procura-ds** e **passo-ds** foram testadas em quatro variantes, de acordo com a estratégia considerada para o armazenamento dos pontos (**guarda-sucesso** ou **guarda-todos**) e consoante o tipo de indicador de descida simpléctico escolhido (**sgradiente** ou **shessiana**). Para a variante **shessiana**, a matriz H_k aproximou apenas a diagonal principal da matriz Hessiana simpléctica. Foram também implementadas as estratégias **passo-HKT**, para a actualização do comprimento do passo, e **ordem-dinâmica**, para a ordenação das direcções do passo de sondagem.

Os algoritmos foram codificados em **Matlab** e testados num conjunto de 27 problemas sem restrições, pertencentes à colecção CUTer [49], na maioria recolhidos em artigos sobre métodos de OSD. As funções objectivo destes problemas são duas vezes continuamente diferenciáveis. Na Tabela 5.2 encontram-se as dimensões dos problemas. Os pontos iniciais

considerados foram os reportados na colecção CUTEr. Os problemas *bdvalue*, *integreq* e *broydn3d* foram considerados na sua versão sem restrições, à semelhança do que é reportado em Moré, Garbow e Hillstom [76]. O critério de paragem para os algoritmos consistiu num comprimento de passo inferior a 10^{-5} ou num máximo de 100000 iterações.

As derivadas simplécticas foram calculadas usando conjuntos Y_k em equilíbrio- Λ , com $\Lambda = 100$. O factor σ_k foi definido como: 1 (se $k - 1$ foi uma iteração sem sucesso); 2 (se $k - 1$ foi uma iteração com sucesso e $\alpha_k = \alpha_{k-1}$); 4 (se $k - 1$ foi uma iteração com sucesso e $\alpha_k > \alpha_{k-1}$). Os valores dos parâmetros p_{max} , s_{min} e s_{max} encontram-se descritos na Tabela 5.1.

O valor inicialmente considerado para o comprimento do passo foi $\alpha_0 = 1$. Em qualquer uma das versões, o factor de contracção foi $\tau^{j_k^-} = 0.5$ e o factor de expansão (quando usado) foi definido como $\tau^{j_k^+} = 2$. Na estratégia **passo-ds** da Figura 5.6, considerámos η igual a 0.75.

dimensão	sgradiente		shessiana	
	guarda-sucesso	guarda-todos	guarda-sucesso	guarda-todos
p_{max}	$2(n+1)$	$4(n+1)$	$4(n+1)$	$8(n+1)$
s_{min}	$(n+1)/2$	$n+1$	n	$2n+1$
s_{max}	$n+1$	$n+1$	$2n+1$	$2n+1$

Tabela 5.1: Dimensões da lista X_k e do conjunto Y_k a utilizar no cálculo das derivadas simplécticas.

As conclusões baseiam-se nos resultados obtidos para duas bases positivas: $[I - I]$ e $[-e I]$. A base positiva maximal $[I - I]$ corresponde a utilizar as direcções coordenadas e os seus simétricos como direcções de sondagem. Esta base positiva foi aquela que conduziu aos melhores resultados para a versão **base**, de entre um conjunto teste constituído por diferentes bases positivas, cujos vectores foram armazenados usando diferentes ordenações. Neste conjunto incluíram-se as bases positivas $[I - I]$, $[-I I]$, $[-e I]$, $[e -I]$, $[I -e]$, $[-I e]$ e uma base positiva minimal com ângulos de amplitude uniforme entre os vários vectores que a constituem (ver o processo de construção descrito na Subsecção 3.1.2). De entre as bases positivas minimais testadas, a base positiva $[-e I]$ foi aquela que apresentou um melhor desempenho. Na Tabela 5.2 encontram-se os resultados obtidos com a versão **base**, para as duas bases positivas seleccionadas.

Considerando todas as combinações, testou-se um total de 120 versões, 112 das quais envolviam estratégias baseadas em derivadas simplécticas.

problema	dimensão	base positiva			
		$D = [-e \ I]$		$D = [I \ -I]$	
		favals	fvalor	favals	fvalor
arwhead	10	1068	4.19e-09	361	0.00e+00
arwhead	20	3718	8.85e-09	721	0.00e+00
bdqrtic	10	2561	1.19e+01	948	1.19e+01
bdqrtic	20	19038	3.54e+01	4120	3.54e+01
bdvalue	10	36820	4.39e-07	33077	4.39e-07
bdvalue	20	255857	1.30e-05	245305	1.29e-05
biggs6	6	339840	6.50e-03	467886	9.58e-06
brownal	10	468150	1.84e+00	74922	2.02e-06
brownal	20	1073871	1.55e+01	284734	1.04e-05
broydn3d	10	2281	3.26e-08	1743	4.52e-09
broydn3d	20	17759	2.91e-07	6868	2.47e-08
integreq	10	2595	4.42e-09	1034	2.35e-10
integreq	20	20941	3.20e-08	4244	4.86e-10
penalty1	10	552357	7.33e-05	234274	7.09e-05
penalty1	20	999305	1.66e-04	535100	1.58e-04
penalty2	10	46696	4.09e-04	496275	4.04e-04
penalty2	20	366131	8.32e-03	1494751	8.30e-03
powellsg	12	192270	1.85e-04	58987	9.85e-07
powellsg	20	480158	3.08e-04	158591	1.64e-06
srosenbr	10	401321	6.83e-05	171061	6.83e-05
srosenbr	20	1076983	2.68e-02	649621	1.37e-04
tridia	10	1000805	5.95e-01	901720	5.85e-01
tridia	20	20483	6.24e-01	6635	6.24e-01
vardim	10	251599	2.23e-05	86316	6.64e-07
vardim	20	961697	1.76e+04	1230761	8.71e-04
woods	12	164675	1.02e-04	110662	3.78e-05
woods	20	435786	3.53e-04	300296	6.29e-05

Tabela 5.2: Conjunto de problemas a testar e resultados para a versão **base**.

5.6.1 Discussão baseada nos melhores resultados

Na Tabela 5.3 são reportados alguns dos resultados obtidos para a base $[I \ -I]$, quando foi usado um indicador de descida simpléctico do tipo **sgradiente**. Nesta tabela estão incluídas as estratégias que conduziram aos melhores resultados, de entre as 120 variantes testadas.

Para cada estratégia e para cada problema, calculámos a percentagem de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos, assim como a variação no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base**. Estas percentagens foram agrupadas por estratégia e os seus valores médios são reportados na segunda e terceira colunas da tabela. As últimas três colunas representam as percentagens cumulativas da distância da iterada final

estratégia	% equilíbrio	favals	distância ao óptimo		
			10^{-7}	10^{-4}	10^{-1}
base	—	—	33.33%	81.48%	92.59%
passo-HKT	—	+4.02%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica	—	-10.99%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-HKT, ordem-dinâmica	—	-15.17%	48.15%	81.48%	92.59%
passo-ds (guarda-sucesso)	14.40%	-3.07%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-ds (guarda-todos)	73.33%	+0.45%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds (guarda-todos)	27.26%	-51.16%	37.04%	85.19%	92.59%
passo-ds, ordem-ds (guarda-todos)	28.56%	-51.47%	37.04%	85.19%	92.59%
passo-HKT, ordem-ds (guarda-todos)	58.51%	-54.22%	51.85%	81.48%	88.89%

Tabela 5.3: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base** (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Resultados seleccionados para o caso **sgradiente** e $D = [I - I]$.

ao óptimo de cada problema.

Analisando as percentagens cumulativas reportadas, facilmente se conclui que a qualidade final do valor da função objectivo é comparável à da versão **base**.

É evidente que nenhuma das estratégias para actualizar o comprimento do passo, **passo-ds** ou **passo-HKT**, teve um impacto positivo por si só. No entanto, a estratégia **passo-ds** apresentou resultados ligeiramente superiores aos de **passo-HKT**.

O melhor resultado alcançado sem a utilização de derivadas simplécticas resulta da combinação de **ordem-dinâmica** com **passo-HKT** (15% de redução no número de cálculos da função objectivo, em comparação com a versão **base**).

Três versões que incorporam a **ordem-ds** permitiram uma redução de cerca de 50% no número de cálculos necessários para a função objectivo. Por si só, o procedimento **ordem-ds** permitiu uma redução de 51%, a contrastar com os 11% de redução obtidos com a estratégia **ordem-dinâmica**.

A melhor versão, que combina **ordem-ds** com **passo-HKT** numa variante **guarda-todos**, permitiu uma redução de 54% no número de cálculos. Na Tabela 5.4 reportam-se, para cada problema, os resultados obtidos com esta estratégia, assim como os resultados obtidos no caso em que apenas se utiliza **ordem-ds** na variante **guarda-todos**.

5.6.2 Discussão baseada na totalidade dos resultados

Os resultados numéricos completos são reportados nas Tabelas 5.5 e 5.6, para a base $[I - I]$, e nas Tabelas 5.7 e 5.8, para a base $[-e I]$.

problema	dimensão	estratégia			
		ordem-ds		ordem-ds,passo-HKT	
		favals	fvalor	favals	fvalor
arwhead	10	361	0.00e+00	361	0.00e+00
arwhead	20	721	0.00e+00	721	0.00e+00
bdqrtic	10	696	1.19e+01	696	1.19e+01
bdqrtic	20	2138	3.54e+01	2138	3.54e+01
bdvalue	10	34922	6.89e-07	28411	6.52e-07
bdvalue	20	255989	1.66e-05	213297	1.65e-05
biggs6	6	105592	4.50e-07	164168	4.53e-07
browna1	10	21045	1.88e-06	38398	2.44e-06
browna1	20	67152	6.16e-06	4227	1.00e+00
broydn3d	10	917	4.73e-09	917	4.73e-09
broydn3d	20	2940	2.35e-08	2940	2.35e-08
integreq	10	597	2.35e-10	597	2.35e-10
integreq	20	1573	4.86e-10	1573	4.86e-10
penalty1	10	126307	7.09e-05	177360	7.09e-05
penalty1	20	229825	1.58e-04	279491	1.58e-04
penalty2	10	55087	4.04e-04	93192	4.05e-04
penalty2	20	189446	8.29e-03	355154	8.29e-03
powellsg	12	594	0.00e+00	614	0.00e+00
powellsg	20	45258	1.31e-06	8702	2.81e-11
srosenbr	10	136327	6.83e-05	119830	6.83e-05
srosenbr	20	567937	1.37e-04	358656	1.36e-04
tridia	10	539119	5.85e-01	908097	5.89e-01
tridia	20	2724	6.24e-01	2828	6.24e-01
vardim	10	5382	2.29e-07	6550	9.15e-08
vardim	20	67487	9.27e-06	71692	1.68e-06
woods	12	59565	3.94e-05	577	0.00e+00
woods	20	106339	6.55e-05	1064	0.00e+00

Tabela 5.4: Resultados para as melhores versões, utilizando **sgradiente** na variante **guarda-todos** e considerando a base positiva $D = [I - I]$.

Começamos por salientar que 91% das versões baseadas em derivadas simplécticas conduziram a um decréscimo do número médio de cálculos da função objectivo. Em 61 das 112 estratégias testadas, envolvendo derivadas simplécticas, obtivemos um percentil de 75% com um valor negativo para a variação no número de avaliações da função objectivo. Isto significa que para cada uma destas 61 estratégias, em 75% dos problemas testados, foi obtida uma redução no número de cálculos necessários.

Os resultados globais mostram uma superioridade de **sgradiente** quando comparado com **shessiana**, o que não é surpreendente dado que o número de pontos necessário para identificar conjuntos em equilíbrio- Λ na variante **sgradiente** é inferior ao necessário em **shessiana**.

estratégia	%equilíbrio	favals	distância ao óptimo		
			10^{-7}	10^{-4}	10^{-1}
base	—	—	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica	—	-10.99%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-HKT	—	+4.02%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,passo-HKT	—	-15.17%	48.15%	81.48%	92.59%
procura-ds (guarda-sucesso)	8.74%	-6.16%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds (guarda-sucesso)	8.20%	-20.97%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,procura-ds (guarda-sucesso)	7.00%	-21.39%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-sucesso)	8.45%	-18.54%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-ds (guarda-sucesso)	14.40%	-3.07%	33.33%	81.48%	92.59%
procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	9.48%	-9.04%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	9.03%	-20.53%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	7.46%	-20.81%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-sucesso)	13.20%	-15.61%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	9.21%	-20.33%	33.33%	81.48%	92.59%
procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	10.74%	-11.53%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	10.30%	-20.01%	40.74%	85.19%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	8.90%	-27.68%	40.74%	85.19%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	10.83%	-21.72%	44.44%	81.48%	92.59%
procura-ds (guarda-todos)	58.74%	-16.61%	37.04%	88.89%	92.59%
ordem-ds (guarda-todos)	27.26%	-51.16%	37.04%	85.19%	92.59%
ordem-ds,procura-ds (guarda-todos)	24.42%	-46.29%	33.33%	88.89%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-todos)	49.34%	-32.02%	37.04%	88.89%	92.59%
passo-ds (guarda-todos)	73.33%	+0.45%	33.33%	81.48%	92.59%
procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	57.80%	-20.23%	37.04%	88.89%	92.59%
ordem-ds,passo-ds (guarda-todos)	28.56%	-51.47%	37.04%	85.19%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	24.34%	-47.81%	33.33%	85.19%	92.59%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-todos)	61.89%	-12.68%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	52.38%	-28.35%	37.04%	88.89%	92.59%
procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	63.99%	-21.62%	44.44%	88.89%	92.59%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-todos)	58.51%	-54.22%	51.85%	81.48%	88.89%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	48.59%	-48.94%	44.44%	85.19%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	62.69%	-27.23%	44.44%	88.89%	92.59%

Tabela 5.5: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simpléticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base** (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso **sgradiente** e $D = [I - I]$.

Repare-se também que, se o gradiente simplético estiver suficientemente próximo do verdadeiro gradiente, então qualquer direcção que faça um ângulo de amplitude reduzida com a direcção simétrica do gradiente simplético será uma direcção de descida. O mesmo não é garantido quando utilizamos uma direcção de Newton simplética, o que permite igualmente

estratégia	%equilíbrio	favals	distância ao óptimo		
			10^{-7}	10^{-4}	10^{-1}
base	—	—	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica	—	-10.99%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-HKT	—	+4.02%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,passo-HKT	—	-15.17%	48.15%	81.48%	92.59%
procura-ds (guarda-sucesso)	0.04%	+0.00%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds (guarda-sucesso)	0.00%	-2.52%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,procura-ds (guarda-sucesso)	0.00%	-2.52%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-sucesso)	0.02%	-11.01%	33.33%	81.48%	92.59%
passo-ds (guarda-sucesso)	0.05%	+0.01%	33.33%	81.48%	92.59%
procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	0.03%	-0.01%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	0.00%	-1.89%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	0.00%	-2.37%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-sucesso)	0.04%	-10.95%	33.33%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	0.03%	-10.96%	33.33%	81.48%	92.59%
procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	0.81%	+2.06%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	0.45%	+9.85%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	0.39%	+10.12%	40.74%	81.48%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	0.92%	-17.11%	48.15%	81.48%	92.59%
procura-ds (guarda-todos)	15.61%	-10.12%	37.04%	81.48%	92.59%
ordem-ds (guarda-todos)	11.33%	-36.31%	33.33%	85.19%	92.59%
ordem-ds,procura-ds (guarda-todos)	15.08%	-28.38%	37.04%	85.19%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-todos)	15.83%	-24.80%	37.04%	81.48%	92.59%
passo-ds (guarda-todos)	44.90%	+15.56%	40.74%	85.19%	92.59%
procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	30.95%	-25.96%	37.04%	85.19%	92.59%
ordem-ds,passo-ds (guarda-todos)	47.99%	-14.83%	40.74%	88.89%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	29.09%	-32.84%	37.04%	85.19%	88.89%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-todos)	44.91%	+7.79%	40.74%	85.19%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	32.00%	-32.67%	37.04%	85.19%	92.59%
procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	27.12%	-28.65%	40.74%	88.89%	92.59%
ordem-ds,passo-HKT(guarda-todos)	25.68%	-43.67%	40.74%	85.19%	92.59%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	26.06%	-45.01%	40.74%	88.89%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	30.67%	-39.22%	40.74%	88.89%	92.59%

Tabela 5.6: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simpléticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base** (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso **shessiana** e $D = [I - I]$.

justificar a superioridade de **sgradiente** quando comparado com **shessiana**. Contudo, nota-se que algumas versões de **shessiana** apresentam um bom desempenho (ver as Tabelas 5.6 e 5.8).

Para a base positiva $[I - I]$ existe uma clara vantagem em usar como estratégia de ar-

estratégia	%equilíbrio	favals	distância ao óptimo		
			10^{-7}	10^{-4}	10^{-1}
base	—	—	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica	—	-23.03%	22.22%	55.56%	81.48%
passo-HKT	—	-29.49%	29.63%	66.67%	85.19%
ordem-dinâmica,passo-HKT	—	-33.98%	29.63%	66.67%	85.19%
procura-ds (guarda-sucesso)	53.82%	-31.92%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds (guarda-sucesso)	51.13%	-42.77%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds,procura-ds (guarda-sucesso)	36.63%	-43.51%	22.22%	51.85%	77.78%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-sucesso)	50.19%	-54.58%	25.93%	55.56%	81.48%
passo-ds (guarda-sucesso)	75.31%	-25.64%	22.22%	59.26%	81.48%
procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	56.10%	-46.69%	25.93%	55.56%	85.19%
ordem-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	57.89%	-30.31%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	43.12%	-47.29%	25.93%	51.85%	77.78%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-sucesso)	75.77%	-27.50%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	55.31%	-53.39%	25.93%	59.26%	81.48%
procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	62.38%	-56.41%	29.63%	62.96%	85.19%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	66.04%	-42.73%	22.22%	55.56%	85.19%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	50.47%	-50.56%	25.93%	55.56%	88.89%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	60.16%	-59.57%	33.33%	62.96%	88.89%
procura-ds (guarda-todos)	21.29%	-34.57%	22.22%	62.96%	81.48%
ordem-ds (guarda-todos)	15.95%	-18.28%	22.22%	51.85%	81.48%
ordem-ds,procura-ds (guarda-todos)	10.74%	+5.34%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-todos)	15.06%	-36.66%	22.22%	62.96%	81.48%
passo-ds (guarda-todos)	33.97%	-19.14%	22.22%	59.26%	81.48%
procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	24.21%	-35.36%	22.22%	62.96%	81.48%
ordem-ds,passo-ds (guarda-todos)	18.71%	-26.12%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	12.04%	-19.24%	22.22%	59.26%	88.89%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-todos)	24.90%	-27.57%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	15.50%	-34.32%	22.22%	55.56%	81.48%
procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	47.59%	-50.71%	29.63%	66.67%	88.89%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-todos)	59.58%	-48.79%	29.63%	62.96%	85.19%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	41.82%	-59.90%	25.93%	62.96%	92.59%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	36.21%	-49.98%	25.93%	66.67%	88.89%

Tabela 5.7: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base** (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso **sgradiente** e $D = [-e \ I]$.

mazenamento de pontos a variante **guarda-todos** em detrimento de **guarda-sucesso** (ver a Tabela 5.5). No entanto, para a base positiva $[-e \ I]$ esta vantagem não é tão evidente (consultar a Tabela 5.7). A mais valia da variante **guarda-todos** pode ser explicada pela elevada frequência de iterações sem sucesso que ocorrem nas últimas iterações de um algoritmo de

estratégia	%equilíbrio	favals	distância ao óptimo		
			10^{-7}	10^{-4}	10^{-1}
base	—	—	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica	—	-23.03%	22.22%	55.56%	81.48%
passo-HKT	—	-29.49%	29.63%	66.67%	85.19%
ordem-dinâmica,passo-HKT	—	-33.98%	29.63%	66.67%	85.19%
procura-ds (guarda-sucesso)	28.35%	-18.88%	25.93%	55.56%	81.48%
ordem-ds (guarda-sucesso)	40.74%	-28.06%	22.22%	55.56%	85.19%
ordem-ds,procura-ds (guarda-sucesso)	20.34%	-39.72%	22.22%	51.85%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-sucesso)	26.46%	-45.62%	22.22%	55.56%	81.48%
passo-ds (guarda-sucesso)	48.85%	-16.47%	22.22%	59.26%	81.48%
procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	28.25%	-30.23%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	39.55%	-29.83%	22.22%	51.85%	81.48%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	21.11%	-34.21%	25.93%	51.85%	81.48%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-sucesso)	48.63%	-26.16%	22.22%	59.26%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-sucesso)	26.92%	-46.94%	22.22%	55.56%	81.48%
procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	32.27%	-48.28%	33.33%	66.67%	85.19%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	45.66%	-41.28%	25.93%	62.96%	85.19%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	25.35%	-51.85%	29.63%	62.96%	85.19%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-sucesso)	33.88%	-48.87%	29.63%	62.96%	85.19%
procura-ds (guarda-todos)	1.09%	-6.44%	18.52%	55.56%	81.48%
ordem-ds (guarda-todos)	3.45%	-11.98%	22.22%	59.26%	81.48%
ordem-ds,procura-ds (guarda-todos)	4.01%	-17.97%	22.22%	59.26%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds (guarda-todos)	0.99%	-22.14%	18.52%	55.56%	81.48%
passo-ds (guarda-todos)	1.45%	+0.55%	22.22%	55.56%	81.48%
procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	1.07%	-4.42%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-ds,passo-ds (guarda-todos)	1.07%	-10.60%	22.22%	59.26%	81.48%
ordem-ds,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	1.90%	-15.73%	22.22%	59.26%	81.48%
ordem-dinâmica,passo-ds (guarda-todos)	1.20%	-22.69%	22.22%	55.56%	81.48%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds (guarda-todos)	1.01%	-22.95%	18.52%	55.56%	81.48%
procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	4.86%	-33.84%	25.93%	66.67%	85.19%
ordem-ds,passo-HKT (guarda-todos)	5.97%	-37.54%	29.63%	62.96%	85.19%
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	6.51%	-48.46%	29.63%	66.67%	85.19%
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT (guarda-todos)	4.88%	-40.92%	29.63%	62.96%	85.19%

Tabela 5.8: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simpléticos (segunda coluna), variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base** (terceira coluna) e percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo (quarta a sexta colunas). Caso **shessiana** e $D = [-e \ I]$.

procura directa direccional.

O impacto das estratégias de ordenação baseadas em indicadores de descida simpléticos, em particular quando consideramos a variante **sgradiente**, é mais visível na base positiva $[I \ -I]$ devido ao elevado número de direcções que a constituem.

As estratégias **procura-ds**, **passo-ds** e **passo-HKT** tiveram um impacto positivo quando testámos a base positiva minimal $[-e \ I]$ (ver Tabela 5.7). Este efeito perdeu-se em $[I \ -I]$, onde a estratégia **ordem-ds** parece ser em si mesma suficiente.

5.6.3 Alguns testes adicionais

Seleccionaram-se alguns dos problemas e testaram-se algumas das estratégias para as dimensões $n = 30$, $n = 40$ e $n = 80$. Os resultados encontram-se nas Tabelas 5.9 e 5.10. As conclusões não apresentam grandes alterações. A variação no número de cálculos para a função objectivo e a qualidade da iterada final não diferem significativamente com o aumento da dimensão do problema, mas sim com o aumento do número de vectores no conjunto gerador positivo ou com o aumento da medida do coseno deste conjunto (o que acontece quando mudamos da base positiva $[-e \ I]$ para a base positiva $[I \ -I]$).

estratégia	%equilíbrio					favals				
	10	20	30	40	80	10	20	30	40	80
base	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
passo-HKT	—	—	—	—	—	18.21%	5.02%	9.70%	19.83%	-8.00%
ordem-ds	30.46%	25.38%	23.16%	19.12%	21.41%	-42.89%	-52.83%	-54.68%	-54.66%	-48.04%
passo-ds, ordem-ds	34.31%	25.00%	25.85%	21.09%	29.19%	-41.43%	-54.37%	-51.34%	-53.30%	-52.80%
passo-HKT, ordem-ds	64.38%	51.64%	48.51%	44.05%	40.24%	-36.93%	-61.10%	-59.83%	-66.41%	-56.93%

Tabela 5.9: Percentagem média de iterações que utilizam indicadores de descida simplécticos e variação média no número de avaliações da função objectivo em comparação com a versão **base**, em função da dimensão dos problemas. Caso **sgradiente**, na variante **guarda-todos** e $D = [I \ -I]$.

Estudámos, também, a sensibilidade das diferentes variantes algorítmicas relativamente ao valor de η usado na estratégia **passo-ds**. Para tal, consideraram-se outros valores para η , nomeadamente 0.5 e 0.95. Os resultados não melhoraram.

Todas as estratégias computacionais foram ainda testadas num outro conjunto de problemas, constituído por sete funções quadráticas geradas aleatoriamente, cada uma com dimensão 10. As funções quadráticas foram definidas como $f(x) = x^\top Ax$, onde $A = C^\top C$ e C é uma matriz gerada de forma aleatória, com entradas pertencentes à distribuição normal reduzida. Os pontos iniciais para o algoritmo também foram gerados aleatoriamente, igualmente usando a distribuição normal reduzida. As conclusões para as diferentes estratégias mantiveram-se essencialmente as mesmas, embora haja uma melhoria nos resultados obtidos para a base minimal $[-e \ I]$. Estes exemplos foram ainda utilizados para estudar as propriedades de descida da direcção simétrica do gradiente simpléctico. Na nossa experiência computacional, o gradiente simpléctico fez um ângulo agudo com o verdadeiro gradiente em

estratégia	distância ao óptimo														
	10^{-7}					10^{-4}					10^{-1}				
	10	20	30	40	80	10	20	30	40	80	10	20	30	40	80
base	45.45%	30.77%	54.55%	46.15%	30.77%	81.82%	76.92%	72.73%	69.23%	69.23%	90.91%	92.31%	81.82%	84.62%	76.92%
passo-HKT	45.45%	38.46%	54.55%	53.85%	38.46%	81.82%	76.92%	72.73%	69.23%	69.23%	90.91%	92.31%	81.82%	76.92%	76.92%
ordem-ds	45.45%	30.77%	54.55%	46.15%	30.77%	81.82%	84.62%	81.82%	76.92%	61.54%	90.91%	92.31%	90.91%	92.31%	69.23%
passo-ds, ordem-ds	45.45%	30.77%	54.55%	46.15%	30.77%	81.82%	84.62%	81.82%	69.23%	61.54%	90.91%	92.31%	90.91%	92.31%	69.23%
passo-HKT, ordem-ds	54.55%	46.15%	54.55%	61.54%	38.46%	81.82%	76.92%	72.73%	69.23%	69.23%	90.91%	84.62%	81.82%	84.62%	76.92%

Tabela 5.10: Percentagens cumulativas para a distância da iterada final ao óptimo, em comparação com a versão **base**, em função da dimensão dos problemas. Caso **sgradiente**, na variante **guarda-todos** e $D = [I \ -I]$.

77% dos casos em que o primeiro foi calculado. Este comportamento tende a acontecer no final do processo de optimização, quando o comprimento do passo é mais pequeno.

5.6.4 Poda das direcções de sondagem

Para uma melhor compreensão dos resultados teóricos desenvolvidos na Secção 5.5, implementámos uma variante computacional da estratégia de poda das direcções de sondagem. Não considerámos o conjunto gerador positivo $D = \{-1, 0, 1\}^n$, como sugerido por Abramson, Audet e Dennis [4], nem verificámos a condição (5.4) antes de eliminarmos as direcções de sondagem (nem mesmo sob uma forma aproximada, usando uma estimativa da constante de Lipschitz). Como consequência, as hipóteses necessárias ao Teorema 5.5.1 não estão a ser respeitadas. Em alternativa, testámos duas estratégias de poda das bases positivas $[I - I]$ e $[-e \ I]$: (i) poda para uma única direcção, concretamente para a direcção de sondagem que faz o menor ângulo com o indicador de descida simpléctico; (ii) poda para todas as direcções que fazem um ângulo agudo com o indicador de descida.

Para obter uma solução final com uma qualidade semelhante à calculada para a versão **base** foi necessário utilizar a base $[I - I]$ e podar para mais do que uma direcção. Neste caso a estratégia de poda permitiu uma redução média de 10% no número de cálculos da função objectivo, quando usámos a variante **guarda-sucesso**, e de 42%, para a variante **guarda-todos**. Contudo, a estratégia de poda tende a gerar um número inferior de pontos de sondagem, o que reduz a possibilidade de identificar conjuntos bem equilibrados.

Uma avaliação do potencial da direcção simétrica do gradiente simpléctico como uma ϵ -aproximação às componentes grandes do simétrico do vector gradiente e o seu uso na poda das direcções de sondagem deve ser objecto de uma investigação mais detalhada. Por exemplo, a utilização do conjunto gerador positivo $D = \{-1, 0, 1\}^n$ e a implementação da condição (5.4), ainda que de uma forma grosseira, poderão ter um impacto positivo nos resultados.

Capítulo 6

Utilização de gradientes simplécticos em procura directa direccional não suave

No Capítulo 5 foram propostas várias estratégias, baseadas em derivadas simplécticas, que permitem melhorar a eficiência dos métodos de procura directa direccional. Estas estratégias baseiam-se na utilização, para determinados efeitos, das derivadas simplécticas (em particular, dos gradientes simplécticos) como aproximações das verdadeiras derivadas. No Teorema 4.1.1 descreveram-se estimativas para o erro de um gradiente simpléctico, enquanto aproximação do verdadeiro gradiente. Contudo, a aplicação deste teorema pressupõe a existência de derivadas parciais da função objectivo e a sua continuidade.

Em problemas de OSD é comum a minimização de funções não suaves. Os métodos de procura directa direccional são adequados a este tipo de optimização porque, por um lado, apenas exigem o cálculo de valores para a função objectivo e, por outro, porque permitem estabelecer alguns resultados de convergência global, supondo apenas a continuidade à Lipschitz da função objectivo (ver a Subsecção 3.2.5).

O principal objectivo deste capítulo é analisar as propriedades dos gradientes simplécticos no contexto da aplicação de um método de procura directa direccional à minimização de uma função não suave $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Esta análise não exige a continuidade do gradiente da função. Alguns dos resultados podem ser vistos como uma generalização das propriedades dos gradientes simplécticos, enquanto aproximações dos verdadeiros gradientes, já estabelecidas para funções continuamente diferenciáveis. Focaremos duas classes particulares de algoritmos de procura directa direccional, para as quais foi analisada a convergência global no âmbito da Optimização Não Suave: os métodos de procura em padrão (ver a Secção 3.2 ou Audet e Dennis [9]) e o método de procura directa com grelha adaptável (ver a Secção 3.3 ou Audet e Dennis [11]).

A análise das propriedades dos gradientes simplécticos de funções não suaves é feita na Secção 6.1, recorrendo-se aos conceitos de subsucessão refinada e de direcção refinada, definidos no Capítulo 3. O uso de gradientes simplécticos em procura directa direccionál é discutido na Secção 6.2. Em particular, na Secção 6.3, mostra-se que é possível identificar conjuntos de amostragem que satisfazem as propriedades necessárias aos resultados estabelecidos na Secção 6.1, quando a optimização é feita recorrendo a métodos de procura em padrão ou ao método de procura directa com grelha adaptável. Na Secção 6.4 são relatados alguns resultados numéricos resultantes da aplicação das estratégias sugeridas na Secção 6.2 a um conjunto de problemas não suaves. O material deste capítulo baseia-se no trabalho de Custódio, Dennis e Vicente [28].

6.1 Propriedades dos gradientes simplécticos limite

De acordo com o que foi dito no Capítulo 3, uma subsucessão $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ de iteradas sem sucesso, gerada por um método de procura directa direccionál, diz-se uma subsucessão refinada se a correspondente subsucessão de comprimentos do passo, $\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, convergir para zero.

Num contexto não suave, a análise de convergência global dos métodos de procura directa direccionál, como a procura em padrão e a procura directa com grelha adaptável, supõe que todas as iteradas geradas pelos algoritmos pertencem a um compacto. Desta forma, sem perda de generalidade, podemos supor que uma subsucessão refinada converge para um ponto limite (ou seja, para um ponto de acumulação).

Conforme foi visto no Capítulo 3, os resultados de convergência global dos métodos de procura directa direccionál estruturam-se em torno das derivadas direccionáls generalizadas de Clarke da função objectivo, calculadas no ponto limite correspondente a uma subsucessão refinada convergente. Logo, é natural analisar o comportamento de gradientes simplécticos calculados em iteradas pertencentes a subsucessões refinadas convergentes.

Para analisar as propriedades dos gradientes simplécticos limite é necessário supor que é sempre possível avaliar a função objectivo nos conjuntos de sondagem utilizados no cálculo dos gradientes simplécticos, ou, pelo menos, nos conjuntos de sondagem associados a iteradas pertencentes à subsucessão refinada em causa. Para podermos garantir a construção destes gradientes, utilizando conjuntos de sondagem correspondentes a subsucessões refinadas, usaremos, ainda, o facto de D_k ser um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$. É também fundamental, na análise destas propriedades, a possibilidade de se considerar subsucessões refinadas convergentes, $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, sendo irrelevante o facto de cada elemento da subsucessão refinada corresponder a uma iteração sem sucesso, ou seja, não necessitaremos da propriedade $f(x_k) \leq f(x_k + \alpha_k d)$ para todo o $d \in D_k$.

Relembramos, ainda, a noção de direcção refinada associada a uma subsucessão refinada

convergente (ver a Definição 3.3.1). As direcções refinadas são limites de sucessões da forma $\{d_k/\|d_k\|\}_{k \in \mathcal{L}}$, onde d_k é uma direcção de sondagem correspondente a uma iterada pertencente a uma subsucessão refinada convergente, $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, e $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$. Na análise que se segue, supomos, sem perda de generalidade, que $\{d_k/\|d_k\|\}$ é convergente para qualquer subsucessão refinada considerada.

Por último, usamos o facto de $\{\alpha_k\|d_k\|\}$ convergir para zero em $\mathcal{K}$. O valor deste limite é garantido trivialmente na procura em padrão, dado que qualquer D_k é um subconjunto de um conjunto gerador positivo, D , finito (ver a Subsecção 3.2.3 ou Audet e Dennis [9]). No caso do método de procura directa com grelha adaptável, trata-se de uma condição imposta sobre as direcções que são usadas no passo de sondagem do algoritmo (ver a Subsecção 3.3.1 ou Audet e Dennis [11]).

De acordo com o que foi referido na Secção 5.4, o facto das iteradas de uma subsucessão refinada corresponderem a iterações sem sucesso e as propriedades geométricas dos conjuntos geradores positivos permitem identificar conjuntos de amostragem em equilíbrio- Λ . No entanto, na análise que se segue, é necessário considerarmos que, dado um elemento de uma subsucessão refinada, é sempre possível identificar um subconjunto Z_k do conjunto de sondagem V_k , definido como

$$Z_k = \{x_k + \alpha_k d : d \in E_k\} \subseteq \{x_k + \alpha_k d : d \in D_k\} = V_k,$$

tal que

$$Y_k = \{x_k\} \cup Z_k$$

está em equilíbrio- Λ para $k \in \mathcal{K}$, para um dado $\Lambda > 0$. Nesta notação, E_k é um subconjunto não vazio de D_k . Designemos por $\mathcal{Z}_k$ o subconjunto do conjunto de índices $\{1, \dots, |D_k|\}$ que define os pontos de sondagem considerados em Z_k (ou, de forma equivalente, as direcções de sondagem em E_k). Um gradiente simpléctico é calculado de uma forma sobredeterminada quando $|\mathcal{Z}_k| \geq n + 1$ e de uma forma determinada ou subdeterminada se $|\mathcal{Z}_k| \leq n$.

Comecemos por provar que, sob determinadas condições, a subsucessão de gradientes simplécticos refinada tem um ponto limite. Para o efeito, sejam

$$\Delta_k = \max\{\|z - x_k\| : z \in Z_k\} = \alpha_k \max\{\|d_k^i\| : d_k^i \in E_k\},$$

$$\nabla_s f(x_k) = V_k \Sigma_k^{-1} U_k^\top \delta_k / \Delta_k \quad \text{e} \quad S_k^\top / \Delta_k = U_k \Sigma_k V_k^\top,$$

onde S_k representa a matriz cujas colunas são $(x_k + \alpha_k d_k^j) - x_k = \alpha_k d_k^j$ e δ_k representa o vector de componentes $f(x_k + \alpha_k d_k^j) - f(x_k)$, com d_k^j a variar em E_k . Para deduzir o resultado pretendido, é necessário supor que o número de direcções, $|\mathcal{Z}_k|$, usadas na construção de um gradiente simpléctico sobredeterminado é uniformemente limitado (ou seja, limitado para

todo o k). Se todos os conjuntos D_k são bases positivas, considerando que a cardinalidade máxima de uma base positiva é $2n$ (ver a Subsecção 3.1.1), então garante-se, trivialmente, que $|\mathcal{Z}_k| \leq 2n$. Na generalidade, é razoável considerar que o número $|D_k|$ de elementos dos conjuntos geradores positivos D_k é uniformemente limitado.

Lema 6.1.1. *Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* tal que $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ está em equilíbrio- Λ . Suponhamos que f é contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* . Então, a sucessão de gradientes simplécticos $\{\nabla_s f(x_k)\}_{k \in \mathcal{K}}$ tem pelo menos um ponto limite.*

Demonstração. Seja Ω a vizinhança de x_* onde f é contínua à Lipschitz, com constante de Lipschitz $\gamma_f > 0$. Por hipótese, a sucessão $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ converge para x_* . Assim, para k suficientemente grande, todas as iteradas x_k pertencem a Ω . Daqui resulta que, para todo o $j \in \mathcal{Z}_k$ e k suficientemente grande,

$$\left| \left(\frac{\delta_k}{\Delta_k} \right)_j \right| \leq \frac{|f(x_k + \alpha_k d_k^j) - f(x_k)|}{\alpha_k \max\{\|d_k^i\| : d_k^i \in E_k\}} \leq \frac{\gamma_f \|d_k^j\|}{\max\{\|d_k^i\| : d_k^i \in E_k\}} \leq \gamma_f.$$

Da cadeia de desigualdades anterior vem que

$$\|\nabla_s f(x_k)\| = \left\| V_k \Sigma_k^{-1} U_k^\top \frac{\delta_k}{\Delta_k} \right\| \leq \|\Sigma_k^{-1}\| \sqrt{|\mathcal{Z}_k|} \gamma_f \leq \|\Sigma_k^{-1}\| \sqrt{|D_k|} \gamma_f.$$

Como $\|\Sigma_k^{-1}\| \leq \Lambda$ para todo $k \in \mathcal{K}$, obtemos que $\{\nabla_s f(x_k)\}_{k \in \mathcal{K}}$ é limitada, facto que implica, trivialmente, o resultado do lema. $\square$

O passo seguinte consiste em analisar, num contexto não suave, as propriedades de um ponto limite de uma subsucessão de gradientes simplécticos, identificado a partir do Lema 6.1.1. Para esta tarefa recorreremos à análise não suave de Clarke [18], cujos conceitos mais básicos foram introduzidos na Subsecção 3.2.5 e que são, agora, complementados com outros elementos.

O conceito de derivada direcional generalizada de Clarke, calculada num ponto x_* , está bem definido para qualquer função contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* . O mesmo acontece com o subdiferencial generalizado de Clarke (também designado por gradiente generalizado), dado por

$$\partial f(x_*) = \{s \in \mathbb{R}^n : f^\circ(x_*; v) \geq v^\top s, \forall v \in \mathbb{R}^n\}.$$

É ainda conhecida a relação

$$f^\circ(x_*; v) = \max\{v^\top s : s \in \partial f(x_*)\}. \quad (6.1)$$

O subdiferencial generalizado de Clarke é um conjunto convexo, não vazio. Quando visto como uma aplicação entre conjuntos, é fechado e localmente limitado (ver Clarke [18]). Pode recorrer-se ao conceito de subdiferencial generalizado de Clarke para reformular o teorema do valor médio para funções apenas localmente contínuas à Lipschitz. De facto, se x e y são pontos em $\mathbb{R}^n$ e f é contínua à Lipschitz num aberto que contém o segmento de recta $[x, y]$, então existe um ponto z em (x, y) tal que

$$f(y) - f(x) = s(z)^\top (y - x), \quad (6.2)$$

para algum $s(z) \in \partial f(z)$ (ver Clarke [18]). Nota-se que $s(z)$ é, neste contexto, um elemento do subdiferencial generalizado de Clarke e não o vector constituído pelas derivadas parciais da função f .

Finalmente, salientamos que no caso de uma função ser estritamente diferenciável num ponto x_* (ver a definição correspondente na Subsecção 3.2.5), o subdiferencial generalizado de Clarke reduz-se a um conjunto singular, mais concretamente a $\partial f(x_*) = \{\nabla f(x_*)\}$ (ver Clarke [18]).

6.1.1 O caso de funções contínuas à Lipschitz

Comecemos por analisar o caso em que $|\mathcal{Z}_k| \leq n$, ou seja, o caso em que todos os gradientes simplécticos são determinados ou subdeterminados. Na prática, o cálculo de gradientes simplécticos subdeterminados não é particularmente relevante. De facto, estes gradientes não ‘aproveitam’ as propriedades geométricas dos conjuntos geradores positivos. Refira-se, ainda, que, na situação limite em que $|\mathcal{Z}_k| = 1$ estamos na presença de aproximações às derivadas direccionais.

Teorema 6.1.1. *Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* . Consideremos uma sucessão de conjuntos em equilíbrio- Λ , $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, tal que $|\mathcal{Z}_k| \leq n$ para todo o $k \in \mathcal{K}$ e suponhamos que $d_k \in E_k$ é uma direcção usada no cálculo de $\nabla_s f(x_k)$ para todo o $k \in \mathcal{K}$. Suponhamos ainda que*

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} \frac{d_k}{\|d_k\|} = v \quad e \quad \lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k \|d_k\| = 0.$$

Seja f contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_ . Então, $\{\nabla_s f(x_k)\}_{k \in \mathcal{K}}$ tem um ponto limite, $\nabla_s f_*$, tal que*

$$f^\circ(x_*; v) \geq \nabla_s f_*^\top v.$$

A demonstração é omitida, uma vez que resulta, essencialmente, da demonstração do próximo teorema. Por sua vez, este é um resultado mais geral. De facto, a igualdade (6.3)

descrita mais à frente reduz-se a $\delta_k = S_k^\top \nabla_s f(x_k)$, quando $|\mathcal{Z}_k| \leq n$, pelo que a demonstração do Teorema 6.1.2 pode ser aplicada de forma trivial.

Consideremos, então, o caso mais interessante em que $|\mathcal{Z}_k| \geq n + 1$ (construção de gradientes simpléticos sobredeterminados). Da definição de gradiente simplético temos que

$$\delta_k = S_k^\top \nabla_s f(x_k) + R_k \delta_k, \quad (6.3)$$

em que $R_k = (I - S_k^\top (S_k S_k^\top)^{-1} S_k)$ representa um operador de projecção no espaço nulo de S_k . Por uma questão de conveniência, designamos as linhas de R_k por $(r_k^j)^\top$, com $j \in \mathcal{Z}_k$.

Teorema 6.1.2. *Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* . Consideremos uma sucessão de conjuntos em equilíbrio- Λ , $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, tal que $|\mathcal{Z}_k| \geq n + 1$ para todo o $k \in \mathcal{K}$ e suponhamos que $d_k \in E_k$ é uma direcção usada no cálculo de $\nabla_s f(x_k)$ para todo o $k \in \mathcal{K}$. Suponhamos ainda que*

$$\lim_{k \in \mathcal{K}} \frac{d_k}{\|d_k\|} = v \quad e \quad \lim_{k \in \mathcal{K}} \alpha_k \|d_k\| = 0. \quad (6.4)$$

Seja f contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_ . Então, $\{\nabla_s f(x_k)\}_{k \in \mathcal{K}}$ tem um ponto limite, $\nabla_s f_* = \lim_{k \in \mathcal{L}} \nabla_s f(x_k)$, $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$, tal que*

$$f^\circ(x_*; v) \geq \nabla_s f_*^\top v + \limsup_{k \in \mathcal{L}} (r_k^{j_k})^\top \left(\frac{\delta_k}{\alpha_k \|d_k\|} \right), \quad (6.5)$$

onde j_k representa o índice em $\mathcal{Z}_k$ para o qual $d_k = d_k^{j_k} \in E_k$.

Demonstração. O Lema 6.1.1 garante a existência de uma subsucessão $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ tal que $\nabla_s f(x_k)$ converge para $\nabla_s f_*$, quando $k \in \mathcal{L}$. Representemos a j_k -ésima linha de (6.3) como

$$\frac{f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k)}{\alpha_k} = \nabla_s f(x_k)^\top d_k + \frac{1}{\alpha_k} (r_k^{j_k})^\top (\delta_k).$$

Recorrendo às propriedades básicas das derivadas direccionais generalizadas para funções localmente contínuas à Lipschitz (ver, por exemplo, a relação (6.1)), concluímos que

$$f^\circ(x_*; v) = f^\circ \left(x_*; \lim_{k \in \mathcal{K}} \frac{d_k}{\|d_k\|} \right) = \lim_{k \in \mathcal{K}} f^\circ \left(x_*; \frac{d_k}{\|d_k\|} \right).$$

Como $\{\alpha_k \|d_k\|\}$ converge para zero, para $k \in \mathcal{K}$,

$$\begin{aligned} f^\circ(x_*; v) &\geq \limsup_{k \in \mathcal{K}} \frac{f(x_k + \alpha_k \|d_k\| \frac{d_k}{\|d_k\|}) - f(x_k)}{\alpha_k \|d_k\|} \\ &= \limsup_{k \in \mathcal{K}} \frac{f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k)}{\alpha_k \|d_k\|} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \limsup_{k \in \mathcal{K}} \left\{ \frac{\nabla_s f(x_k)^\top d_k}{\|d_k\|} + (r_k^{j_k})^\top \left(\frac{\delta_k}{\alpha_k \|d_k\|} \right) \right\} \\
&\geq \nabla_s f_*^\top v + \limsup_{k \in \mathcal{L}} (r_k^{j_k})^\top \left(\frac{\delta_k}{\alpha_k \|d_k\|} \right),
\end{aligned}$$

o que permite concluir o resultado do teorema. $\square$

A demonstração do Teorema 6.1.1 segue os mesmos passos desta última demonstração, embora sem o termo correspondente à matriz R_k .

6.1.2 O caso de funções estritamente diferenciáveis

Para uma melhor compreensão do Teorema 6.1.2 e da relevância do termo em $\limsup$ em (6.5), consideremos o caso em que f é estritamente diferenciável em x_* e em que $|\mathcal{Z}_k|$ é constante para todo o $k \in \mathcal{K}$. Como exemplo, analisemos a situação em que utilizamos as direcções coordenadas, considerando $D_k = [I \ -I]$ para todo o k . Calculemos um gradiente simplético sobredeterminado, utilizando todos os pontos de sondagem ($|\mathcal{Z}_k| = 2n$). Facilmente se verifica que

$$R_k = I_{2n} - S_k^\top (S_k S_k^\top)^{-1} S_k = 0.5 \begin{bmatrix} I & I \\ I & I \end{bmatrix}.$$

Usando o Teorema 6.1.2, deduzem-se as $2n$ desigualdades

$$f'(x_*; e_i) \geq \nabla_s f_*^\top e_i + 0.5 [f'(x_*; e_i) + f'(x_*; -e_i)], \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.6)$$

$$f'(x_*; -e_i) \geq \nabla_s f_*^\top (-e_i) + 0.5 [f'(x_*; e_i) + f'(x_*; -e_i)], \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.7)$$

Uma vez que f é estritamente diferenciável em x_* , temos que $f'(x_*; e_i) + f'(x_*; -e_i) = 0$, o que resulta na eliminação das parcelas envolvendo 0.5 nas desigualdades (6.6)-(6.7) (por sua vez resultantes da parcela relativa ao $\limsup$ em (6.5)).

O próximo corolário resume uma consequência do Teorema 6.1.2, quando a função é estritamente diferenciável no ponto limite da subsucessão refinada.

Corolário 6.1.1. *Consideremos verdadeiras as hipóteses do Teorema 6.1.2. Suponhamos, ainda, que a função f é estritamente diferenciável em x_* , que $|\mathcal{Z}_k|$ é constante para todo o $k \in \mathcal{K}$ e que a forma normalizada de $\{E_k\}$, dada por $\{E_k/\|d_k\|\}$, converge para V_v em $\mathcal{K}$. Então, para a direcção refinada $v \in V_v$ dada por (6.4), tem-se que*

$$f^\circ(x_*; v) = (f'(x_*; v) = \nabla f(x_*)^\top v) = \nabla_s f_*^\top v. \quad (6.8)$$

Demonstração. Começemos por salientar que

$$R_k = I - (E_k/\|d_k\|)^\top \left((E_k/\|d_k\|)(E_k/\|d_k\|)^\top \right)^{-1} (E_k/\|d_k\|),$$

o que implica que R_k converge para $R_* \equiv I - V_v^\top (V_v V_v^\top)^{-1} V_v$ em $\mathcal{K}$.

Desta forma, o resultado do corolário obtém-se substituindo as últimas duas desigualdades por igualdades, na demonstração do Teorema 6.1.2. Nota-se que a parcela envolvendo $\limsup$ em (6.5) é nula:

$$(I - V_v^\top (V_v V_v^\top)^{-1} V_v) f'(x_*; V_v) = (I - V_v^\top (V_v V_v^\top)^{-1} V_v) V_v^\top \nabla f(x_*) = 0.$$

Nestas igualdades, $f'(x_*; V_v)$ representa o vector formado pelas derivadas direccionais generalizadas de f , calculadas em x_* , ao longo das direcções de V_v . $\square$

Salienta-se que V_v depende de v , uma vez que a normalização das colunas de E_k é feita relativamente a $\|d_k\|$, por sua vez associada à direcção refinada v . Suponhamos, agora, que é possível aplicar o Corolário 6.1.1 a um conjunto de direcções refinadas linearmente independentes, para as quais $V_v = V$ para todo o v . Neste caso, ao aplicar-se o Corolário 6.1.1 (a relação (6.8)) para cada $v \in V$, conclui-se que $\nabla_s f_* = \nabla f(x_*)$.

O próximo teorema restringe-se ao caso em que f é estritamente diferenciável no ponto limite x_* de uma subsucessão refinada convergente. Este resultado é estabelecido apenas para gradientes simplécticos determinados ou sobredeterminados ($|\mathcal{Z}_k| \geq n$). No entanto, é válido qualquer que seja a cardinalidade $|\mathcal{Z}_k| = |E_k| \geq n$ e não exige qualquer hipótese relativa ao limite das direcções normalizadas de E_k .

Teorema 6.1.3. *Seja $\{x_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ uma subsucessão refinada convergente para x_* tal que $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ é uma sucessão de conjuntos em equilíbrio- Λ e $|\mathcal{Z}_k| \geq n$ para todo o $k \in \mathcal{K}$. Seja f estritamente diferenciável em x_* . Então, existe uma subsucessão de índices $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ para a qual*

$$\lim_{k \in \mathcal{L}} \nabla_s f(x_k) = \nabla f(x_*).$$

Demonstração. Como f é estritamente diferenciável em x_* , então f é contínua à Lipschitz numa vizinhança de x_* , pelo que podemos aplicar o Lema 6.1.1. Seja $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ o conjunto de índices para os quais a correspondente sucessão de gradientes simplécticos é convergente.

O teorema do valor médio para funções localmente contínuas à Lipschitz, formalizado em (6.2), garante que, para $j \in \mathcal{Z}_k$ e $k \in \mathcal{L}$ suficientemente grande, se tem que

$$f(x_k + \alpha_k d_k^j) - f(x_k) = \alpha_k s(z_k^j)^\top d_k^j,$$

em que z_k^j é um ponto pertencente ao segmento de recta $(x_k, x_k + \alpha_k d_k^j)$ e $s(z_k^j) \in \partial f(z_k^j)$.

Sabemos que ∂f é localmente limitada, enquanto aplicação entre conjuntos, o que permite concluir que $\{s(z_k^j)\}_{k \in \mathcal{L}}$ é limitada. Como ∂f é uma aplicação fechada entre conjuntos e $\{z_k^j\}$ converge para x_* em $\mathcal{L}$, qualquer ponto limite de $\{s(z_k^j)\}_{k \in \mathcal{L}}$ está necessariamente em $\partial f(x_*)$. Assim, $\{s(z_k^j)\}$ converge para $\nabla f(x_*)$ em $\mathcal{L}$.

Para todo o $j \in \mathcal{Z}_k$,

$$f(x_k + \alpha_k d_k^j) - f(x_k) = \alpha_k \nabla f(x_*)^\top d_k^j + \alpha_k [s(z_k^j) - \nabla f(x_*)]^\top d_k^j.$$

Designemos por $\bar{r}_k$ o vector de dimensão $|\mathcal{Z}_k|$ e componentes $[s(z_k^j) - \nabla f(x_*)]^\top d_k^j$. Então,

$$\delta_k = S_k^\top \nabla f(x_*) + \alpha_k \bar{r}_k$$

e

$$\nabla_s f(x_k) \equiv (S_k S_k^\top)^{-1} S_k \delta_k = \nabla f(x_*) + \alpha_k (S_k S_k^\top)^{-1} S_k \bar{r}_k. \quad (6.9)$$

Além disso,

$$\alpha_k (S_k S_k^\top)^{-1} S_k \bar{r}_k = \frac{\alpha_k}{\Delta_k} [(S_k / \Delta_k)(S_k / \Delta_k)^\top]^{-1} (S_k / \Delta_k) \bar{r}_k. \quad (6.10)$$

Seja $\tilde{r}_k$ o vector de dimensão $|\mathcal{Z}_k|$ e componentes $\|s(z_k^j) - \nabla f(x_*)\|$. Facilmente se verifica que

$$\|\bar{r}_k\| \leq \max\{\|d_k^i\| : d_k^i \in E_k\} \|\tilde{r}_k\|.$$

Desta desigualdade, da relação (6.10) e do equilíbrio- Λ de $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ vem que

$$\|\alpha_k (S_k S_k^\top)^{-1} S_k \bar{r}_k\| \leq \frac{1}{\max\{\|d_k^i\| : d_k^i \in E_k\}} \|\Sigma_k^{-1}\| \|\bar{r}_k\| \leq \Lambda \|\tilde{r}_k\|.$$

A demonstração fica concluída, recorrendo a (6.9), ao notar que $\{\tilde{r}_k\}$ converge para 0 em $\mathcal{L}$. $\square$

Não existe a garantia de que o resultado do Teorema 6.1.3 seja verdadeiro quando os gradientes simplécticos são calculados com menos do que $n + 1$ pontos ($|\mathcal{Z}_k| < n$). Aliás, neste caso, mesmo quando a função é continuamente diferenciável, também não existe a garantia de que o resultado seja verdadeiro, como se pode observar à luz do Teorema 4.1.1 (nota-se que $\hat{V} \neq I$ quando $q < n$)

Por outro lado, da demonstração do Teorema 6.1.3, temos que

$$\|\nabla f(x_*) - \nabla_s f(x_k)\| \leq \Lambda \|\tilde{r}_k\|, \text{ com } \lim_{k \in \mathcal{L}} \|\tilde{r}_k\| = 0,$$

um resultado que pode ser visto como análogo ao estabelecido no Teorema 4.1.1, mas agora, num contexto não suave.

6.2 Aplicações em métodos de procura directa direccional

Seja f uma função contínua à Lipschitz numa vizinhança de um ponto x_* . O ponto x_* diz-se um ponto estacionário, segundo a definição de Clarke [18], se $f^\circ(x_*; v) \geq 0$, para toda a direcção v em $\mathbb{R}^n$. Prova-se, facilmente, que se a função f for estritamente diferenciável em x_* então, para garantir a estacionariedade de x_* , é suficiente garantir que $f^\circ(x_*; d) \geq 0$ para todo o $d \in D$, onde D representa um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$.

Os resultados estabelecidos na Secção 6.1 sugerem, por exemplo, a definição de um novo critério de paragem para um algoritmo de procura directa direccional que explore um conjunto gerador positivo em cada iteração. De facto, se numa iteração sem sucesso do algoritmo

$$\nabla_s f(x_k)^\top (\alpha_k d) \geq -\epsilon_{tol}, \quad \forall d \in E_k,$$

para uma dada tolerância $\epsilon_{tol} > 0$, então parece-nos sensato terminar a execução do algoritmo. Porém, dever-se-á garantir que $|\mathcal{Z}_k| \geq n + 1$. Uma escolha natural para satisfazer esta condição é considerar $E_k = D_k$. Contudo, a nossa experiência numérica mostra que a utilização de um critério de paragem deste tipo apresenta um desempenho semelhante ao uso de um critério de paragem baseado somente no valor de α_k .

A estratégia de ordenação baseada em gradientes simplécticos, sugerida na Secção 5.2, pode ser aplicada a um qualquer algoritmo que explore conjuntos geradores positivos. De facto, pode definir-se um indicador de descida ao considerar $-\nabla_s f(x_k)$ e, posteriormente, ordenar os vectores do conjunto gerador positivo de acordo com a magnitude crescente da amplitude dos ângulos que estes formam com o indicador de descida. Alguns resultados numéricos, relativos à aplicação desta estratégia a problemas não suaves, são reportados na Secção 6.4.

6.3 Validação das estratégias propostas no contexto da procura directa direccional não suave

O cálculo de gradientes simplécticos sobredeterminados, usando as direcções de conjuntos geradores positivos, foi abordado na Secção 5.4. Uma possibilidade consiste em usar a totalidade das direcções de sondagem, ou seja, usar todos os vectores em cada conjunto gerador positivo considerado no passo de sondagem. É fácil verificar que os correspondentes gradientes simplécticos sobredeterminados estão bem definidos (ver o Teorema 5.4.1).

Nesta secção, estamos interessados em abordar o equilíbrio- Λ das sucessões de conjuntos de sondagem em dois contextos algorítmicos distintos, relativos a métodos de procura directa

direcciona. Em particular, é analisada a validade das condições necessárias aos teoremas da Secção 6.1 para a procura em padrão (ver a Secção 3.2 ou Audet e Dennis [9]) e para a procura directa com grelha adaptável (ver a Secção 3.3 ou Audet e Dennis [11]).

6.3.1 Procura em padrão

De acordo com o que foi visto no Capítulo 3, em cada iteração de um método de procura em padrão é permitida a selecção de um conjunto gerador positivo distinto, D_k . Estes conjuntos geradores positivos são subconjuntos de um conjunto gerador positivo, D , com um número finito de elementos. Deste facto, resulta a finidade do número de conjuntos geradores positivos distintos que é possível considerar, pelo que também é finito o número de conjuntos de direcções distintos $E_k \subseteq D_k$, usados na construção de gradientes simplécticos.

Assim, todas as subsucessões de conjuntos de sondagem equilibrados, $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$, construídas com base em subsucessões refinadas, estão em equilíbrio- Λ para algum $\Lambda > 0$ apenas dependente de D (ver o Teorema 5.4.1). O cálculo de conjuntos de sondagem equilibrados, Y_k , para a construção de gradientes simplécticos, pode adoptar, por exemplo, a escolha $E_k = D_k$.

A existência de subsucessões refinadas convergentes, geradas por um algoritmo de procura em padrão, foi provada por Audet e Dennis [9] (ver o Teorema 3.2.6). Dado que D é um conjunto finito, como $\{\alpha_k\}$ converge para zero em subsucessões refinadas, é fácil mostrar que $\{\alpha_k \|d_k\|\}$ converge para zero e que existem direcções refinadas.

6.3.2 Procura directa com grelha adaptável

A existência de subsucessões refinadas convergentes, geradas por um método de procura directa com grelha adaptável, foi estabelecida por Audet e Dennis [11] (ver, novamente, o Teorema 3.2.6). As propriedades das direcções de sondagem, utilizadas por um método de procura directa com grelha adaptável (ver (3.10) e pontos seguintes), permitem afirmar que, para qualquer subsucessão refinada, $\{\alpha_k \|d_k\|\}$ converge para zero. Como foi dito na Secção 3.3, é igualmente garantida a existência de direcções refinadas.

Consideremos, agora, a implementação prática, sugerida por Audet e Dennis [11], de um método de procura directa com grelha adaptável, descrita na Subsecção 3.3.3. Nesta implementação, os conjuntos geradores positivos considerados, D_k , são da forma $[B_k - B_k]$ ou $[B_k - \sum_{j=1}^n b_k^j]$.

Comecemos por analisar o caso em que consideramos uma base positiva maximal $[B_k - B_k]$. Se pretendermos calcular gradientes simplécticos sobredeterminados, então poderemos considerar $E_k = D_k = [B_k - B_k]$. Neste caso, $S_k = \alpha_k [B_k - B_k]$ e $\Delta_k = \alpha_k \max\{\|b_k^i\| : b_k^i \in B_k\}$.

Se utilizarmos uma base positiva minimal, $[B_k - \sum_{j=1}^n b_k^j]$, então o cálculo de gradientes simpléticos sobredeterminados é igualmente directo. Basta-nos considerar $E_k = D_k = [B_k - \sum_{j=1}^n b_k^j]$. Nesta situação, a matriz S_k toma a forma $S_k = \alpha_k [B_k - \sum_{j=1}^n b_k^j]$ e $\Delta_k = \alpha_k \max\{\| - \sum_{j=1}^n b_k^j \|, \|b_k^i\| : b_k^i \in B_k\}$.

Sabe-se que o menor valor singular de uma matriz não decresce quando se adicionam linhas ou colunas a essa matriz. Logo, em qualquer dos casos (maximal ou minimal, acima expostos), as correspondentes sucessões de conjuntos de amostragem $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ estão em equilíbrio- Λ desde que a inversa da matriz $\alpha_k B_k / \Delta_k$ seja, em norma, uniformemente limitada em $\mathcal{K}$. Demonstramos este facto no caso das bases positivas maximais. Para as bases positivas minimais a definição de Δ_k é ligeiramente diferente, mas a demonstração é análoga.

De acordo com o que foi visto na Subsecção 3.3.3, a matriz B_k resulta de permutações de linhas e de colunas de uma matriz triangular inferior L_k , em que cada elemento da diagonal principal é dado por $\pm 2^\ell$ e os elementos abaixo da diagonal principal são inteiros pertencentes ao intervalo aberto $(-2^\ell, 2^\ell)$, com $\ell = -\log_4(\alpha_k)$. Daqui resulta que os elementos da diagonal principal são $\pm 1/\sqrt{\alpha_k}$ e os elementos abaixo da diagonal principal são inteiros no intervalo aberto $(-1/\sqrt{\alpha_k}, 1/\sqrt{\alpha_k})$. Uma vez que a norma ℓ_2 de uma matriz é invariante a permutações de colunas e de linhas da matriz, recorrendo à propriedade dos valores singulares mencionada anteriormente, concluimos que

$$\|\Sigma_k^{-1}\| \leq \|(\alpha_k B_k / \Delta_k)^{-1}\| = \|(\alpha_k L_k / \Delta_k)^{-1}\|. \quad (6.11)$$

É fácil verificar que $\alpha_k L_k$ é uma matriz triangular inferior com elementos na diagonal principal $\pm \sqrt{\alpha_k}$ e elementos abaixo da diagonal principal no intervalo $(-\sqrt{\alpha_k}, \sqrt{\alpha_k})$. Logo, as normas das colunas de $\alpha_k L_k$ pertencem ao intervalo $[\sqrt{\alpha_k}, \sqrt{n\alpha_k})$. Nota-se, ainda, que $\alpha_k L_k / \Delta_k$ é uma matriz triangular inferior formada por elementos na diagonal principal com valores absolutos em $(1/\sqrt{n}, 1]$ e cujos elementos abaixo da diagonal principal apresentam valores no intervalo $(-1, 1)$.

Por outro lado, sabe-se que a norma ℓ_1 da inversa de uma matriz não singular, triangular inferior, de dimensão n é limitada por

$$\|L^{-1}\|_1 \leq \frac{(\beta_1 + 1)^{n-1}}{\beta_2},$$

onde $\beta_1 = \max_{i>j} |\ell_{ij}|/|\ell_{ii}|$ e $\beta_2 = \min_i |\ell_{ii}|$ (ver os trabalhos de Lemeire [61] e Higham [53]). Assim, obtemos (com $\beta_1 = 1$ e $\beta_2 = 1/\sqrt{n}$):

$$\|(\alpha_k L_k / \Delta_k)^{-1}\| \leq \sqrt{n} \|(\alpha_k L_k / \Delta_k)^{-1}\|_1 \leq n 2^{n-1}. \quad (6.12)$$

Combinando (6.11) e (6.12), concluimos que $\{Y_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ está em equilíbrio- Λ , com $\Lambda = n 2^{n-1}$.

6.4 Resultados computacionais

Nos testes computacionais considerámos um conjunto de 14 problemas não suaves, representativo de diferentes tipos de não diferenciabilidade, recolhido a partir da literatura de Optimização Não Suave. Tanto quanto nos foi possível verificar, todas as funções são contínuas. Na Tabela 6.1 encontra-se uma lista dos problemas considerados.

problema	fonte	dimensão
activefaces	[52]	20
elattar	[71]	6
EVD61	[71]	6
filter	[71]	9
goffin	[71]	50
HS78	[71]	5
L1HILB	[71]	50
MXHILB	[71]	50
osborne2	[71]	11
PBC1	[71]	5
polak2	[71]	10
shor	[71]	5
wong1	[71]	7
wong2	[71]	10

Tabela 6.1: Conjunto de funções não suaves considerado nos testes computacionais.

Os resultados da aplicação de dois métodos de procura em padrão a este conjunto de problemas são relatados na Tabela 6.2. A versão **base** corresponde a uma implementação simples da procura em padrão, com um passo de sondagem oportunista. Como base positiva a explorar no passo de sondagem considerámos a base $[I - I]$. Não foi implementado qualquer passo de procura e o comprimento do passo foi reduzido a metade em iterações sem sucesso e mantido constante nas iterações bem sucedidas. Esta versão **base** coincide com a do Capítulo 5. A versão **ordem-ds** difere da versão **base** apenas na ordenação das direcções de sondagem, que é feita de acordo com o procedimento descrito na Figura 5.2. Como indicador de descida considerou-se a direcção simétrica do gradiente simpléctico, sendo este calculado numa variante **guarda-todos** (ver a Secção 5.1). Imediatamente antes do passo de sondagem, o algoritmo tenta construir um gradiente simpléctico a partir de um conjunto em equilíbrio- Λ (considerámos Λ igual a 100), com o maior número de pontos permitido. Este número de pontos deverá estar entre $s_{min} = (n + 1)/2$ e $s_{max} = 2n + 1$, de acordo com a notação da Secção 5.6. Esta versão corresponde à estratégia que permitiu alcançar os melhores resultados computacionais na Secção 5.6, diferindo apenas no número de pontos permitido na construção de um gradiente simpléctico. Neste caso, permite-se o cálculo de

gradientes simplécticos sobredeterminados ($s_{max} = 2n + 1$). Como critério de paragem considerou-se um valor do comprimento do passo inferior a 10^{-5} .

A coluna **fmelhor** da Tabela 6.2 representa o melhor valor para a função objectivo, relatado na referência considerada, **favals** designa o número total de cálculos da função objectivo e **fvalor** denota o valor da função objectivo na iterada final calculada pelo algoritmo.

problema	fmelhor	favals		fvalor	
		base	ordem-ds	base	ordem-ds
activefaces	0.00e+00	913	713	2.30e+00	2.30e+00
elattar	5.60e-01	1635	569	6.66e+00	6.91e-01
EVD61	3.49e-02	538	335	3.16e-01	9.07e-02
filter	6.19e-03	370	333	9.50e-03	9.50e-03
goffin	0.00e+00	22526	17038	0.00e+00	0.00e+00
HS78	-2.92e+00	329	212	-1.52e+00	2.07e-04
L1HILB	0.00e+00	3473240	7660	2.33e+00	2.20e-01
MXHILB	0.00e+00	26824	3164	1.24e+00	1.24e+00
osborne2	4.80e-02	727	761	2.80e-01	1.01e-01
PBC1	2.23e-02	287	264	4.39e-01	4.34e-01
polak2	5.46e+01	2179	1739	5.46e+01	5.46e+01
shor	2.26e+01	215	257	2.43e+01	2.34e+01
wong1	6.81e+02	343	366	6.85e+02	6.85e+02
wong2	2.43e+01	819	763	3.97e+01	2.58e+01

Tabela 6.2: Resultados computacionais relativos à ordenação das direcções de sondagem, recorrendo a gradientes simplécticos, quando aplicada a um conjunto de problemas não suaves.

Os resultados evidenciam, de forma clara, a vantagem da utilização de uma estratégia de ordenação das direcções de sondagem, quando minimizamos funções não suaves com recurso a um método de procura em padrão. A redução média no número de cálculos da função objectivo é, aproximadamente, 27%, sendo em alguns casos bastante significativa. Quando ocorre um acréscimo no número de cálculos, este é relativamente pequeno. A redução média obtida na Secção 5.6, para funções continuamente diferenciáveis, foi de cerca de 50%.

Os métodos de procura directa direcciona são bem compreendidos, quer de um ponto de vista teórico, quer na sua vertente numérica. Porém, a sua aplicação a funções não suaves não está estudada com a mesma profundidade. Neste tipo de funções existem características que podem conduzir a um pior desempenho numérico destes métodos. Neste capítulo analisámos algumas propriedades dos gradientes simplécticos que, de certo modo, validam o desempenho numérico observado na prática.

Capítulo 7

Dois novos algoritmos para Optimização Sem Derivadas

Neste capítulo propomos dois novos algoritmos para a minimização de uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, não sujeita a restrições e para a qual não dispomos de qualquer informação acerca das derivadas. O primeiro algoritmo, descrito na Secção 7.2, é um método de procura directa direccional curvilínea. O segundo método, exposto na Secção 7.4, consiste numa abordagem híbrida, combinando as procuras directa e unidireccional.

Como foi referido no Capítulo 2, uma das classes de métodos adequadas à resolução de problemas de OSD é a classe dos métodos de procura directa direccional. De acordo com o que foi visto no Capítulo 3, as propriedades de convergência global desta classe de algoritmos resultam da análise do comportamento da função ao longo de direcções com determinadas propriedades de descida, em particular, ao longo de vectores pertencentes a conjuntos geradores positivos ou a bases positivas (ver a Secção 3.1). No primeiro algoritmo, propomos a substituição dos vectores por curvas.

O uso de direcções curvilíneas, em algoritmos de optimização baseados em derivadas, remonta às contribuições de McCormick [74], Moré e Sorensen [77] e Goldfarb [47]. Mais recentemente, Ferris, Lucidi e Roma [42] utilizaram uma estratégia não monótona num algoritmo de procura unidireccional curvilínea. Uma extensão deste último algoritmo, adequada à optimização de grandes dimensões, foi proposta por Gould, Lucidi, Roma e Toint [48]. Em qualquer destes casos, uma vez que as derivadas da função são conhecidas, o principal objectivo, ao utilizar direcções de procura curvilíneas (e, em particular, direcções de curvatura negativa), é garantir a convergência global dos algoritmos para pontos estacionários que satisfaçam as condições necessárias de segunda ordem.

Na ausência de derivadas, o nosso objectivo passa por incorporar, nos algoritmos, alguma informação relativa à curvatura da função objectivo, no sentido de os tornar mais eficientes. Foi esta a motivação para o primeiro algoritmo, que pode ser visto como um método de

procura directa direcciona curvilínea. Cada uma das curvas consideradas tem uma forma quadrática, definida por um indicador de descida simpléctico e uma direcção pertencente a um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$.

Nos Capítulos 5 e 6 desta dissertação, evidenciou-se a utilidade dos indicadores de descida baseados em derivadas simplécticas (e, em particular, das direcções simétricas dos gradientes simplécticos), como processo de melhoramento da eficiência de uma iteração de um método de procura directa direcciona. Os gradientes simplécticos são, ainda, utilizados como direcções de procura nos algoritmos descritos no Capítulo 4 (como, por exemplo, no método de filtro implícito de Bortz e Kelley [15] ou na versão de procura unidirecciona proposta por Conn, Scheinberg e Vicente [24]). Assim sendo, parece-nos adequado combinar os algoritmos de procura unidirecciona baseados em gradientes simplécticos (considerando o seu bom desempenho), com os métodos de procura directa direcciona (dada a sua robustez). Com esta motivação, desenvolvemos um algoritmo híbrido, situado entre um método de procura unidirecciona baseado em derivadas simplécticas (de primeira e segunda ordem) e um método de procura directa direcciona.

Na Secção 7.1 são apresentados os conceitos necessários à análise de convergência global dos dois algoritmos. O método de procura directa direcciona curvilínea é descrito na Secção 7.2. A Secção 7.3 é dedicada à sua análise de convergência global. Uma descrição detalhada da estrutura do algoritmo híbrido de procura directa e unidirecciona encontra-se na Secção 7.4, sendo as respectivas propriedades de convergência global analisadas na Secção 7.5.

7.1 Decréscimo suficiente e direcções de descida simpléctica

Como foi visto no Capítulo 3, a análise da convergência global dos métodos de procura directa direcciona assenta em dois procedimentos: na amostragem da função objectivo ao longo de direcções com propriedades de descida adequadas e no uso de uma estratégia de globalização, que garanta a convergência para zero de uma subsucessão de comprimentos do passo.

Uma estratégia de globalização pode basear-se, por exemplo, no uso (implícito) de grelhas racionais, em que o espaçamento entre pontos é da ordem do comprimento do passo (ver a Subsecção 3.2.3). Neste caso, para aceitar um novo ponto gerado pelo algoritmo, é apenas exigido um decréscimo simples do valor da função a minimizar. Impondo algumas hipóteses relativas à estratégia utilizada na actualização do comprimento do passo e ao cálculo das direcções que constituem os conjuntos geradores positivos considerados, garante-

-se a convergência de uma subsucessão de comprimentos do passo para zero (ver, novamente, a Subsecção 3.2.3). Quando utilizamos ‘direcções’ de procura curvilíneas é difícil garantir, *a priori*, que os pontos gerados pelo algoritmo pertencem a algum tipo de grelha ou reticulado racional. Como alternativa, pode considerar-se uma estratégia de globalização baseada na exigência de um decréscimo suficiente para o valor da função objectivo. Na ausência de derivadas ou de suas aproximações, uma condição de decréscimo suficiente para aceitar um novo ponto pode ser idêntica à da expressão (3.3).

O outro elemento essencial na análise de convergência global de um método de procura directa direccional são as propriedades dos conjuntos geradores positivos. Para funções continuamente diferenciáveis, a Proposição 3.1.2 garante a existência de uma direcção de descida entre os vectores pertencentes a um conjunto gerador positivo. No entanto, o teste das direcções de sondagem pode resultar num número excessivo de cálculos para a função. Com o objectivo de melhorar a eficiência deste procedimento de amostragem, propôs-se, na Secção 5.1, a construção de indicadores de descida baseados em derivadas simplécticas.

O calculo de derivadas simplécticas foi descrito na Secção 4.1. No caso linear, as componentes de um gradiente simpléctico, g , calculado num ponto x , coincidem com os coeficientes do termo linear de um modelo de interpolação $m(y) = c + g^\top(y - x)$, centrado em x e que interpola a função nos restantes pontos do conjunto de amostragem. No caso quadrático, um modelo de interpolação polinomial proporciona, simultaneamente, um gradiente simpléctico, g , e uma Hessiana simpléctica, H .

Foi referido, anteriormente, que a qualidade das derivadas simplécticas, enquanto aproximações das verdadeiras derivadas, depende, de forma directa, da qualidade da geometria do conjunto de amostragem considerado (ver a Subsecção 4.1.3). De facto, se um gradiente simpléctico, g , é calculado num ponto x , a partir de um conjunto em equilíbrio- Λ , então

$$\|\nabla f(x) - g\| \leq \kappa_{eg} \Delta, \quad (7.1)$$

onde $\kappa_{eg} > 0$ depende, essencialmente, da constante $\Lambda > 0$ e da constante de Lipschitz de ∇f , ambas referentes a uma bola de raio Δ , centrada em x , que contém o conjunto de amostragem. No caso quadrático, supondo a continuidade à Lipschitz de $\nabla^2 f$ na mesma bola, é possível deduzir limites análogos para o valor do erro nas derivadas simplécticas:

$$\|\nabla f(x) - g\| \leq \kappa_{egH} \Delta^2 \quad \text{e} \quad \|\nabla^2 f(x) - H\| \leq \kappa_{eH} \Delta. \quad (7.2)$$

Este assunto é analisado em Conn, Scheinberg e Vicente [26, 23].

Na Secção 5.1 descreveu-se o uso de gradientes simplécticos e, mais geralmente, de derivadas simplécticas para calcular indicadores de descida. Não podemos afirmar que a direcção

simétrica de um gradiente simpléctico é uma ‘verdadeira’ direcção de descida (no sentido em que faz um ângulo agudo com a direcção simétrica do gradiente). No entanto, os gradientes simplécticos são boas aproximações dos verdadeiros gradientes, quando calculados a partir de conjuntos de amostragem com geometria adequada. Assim, se pretendemos considerar como indicadores de descida outra forma de direcções simplécticas, devemos relacioná-las com estes gradientes. Com este objectivo, consideremos um gradiente simpléctico $g \neq 0$, calculado num ponto x . Uma direcção d , calculada usando derivadas simplécticas, diz-se uma *direcção de descida simpléctica* se existirem constantes c_1 e c_2 em $(0, 1]$, independentes de x , g e d , tais que:

$$g^\top d \leq -c_1 \|g\|^2 \quad \text{e} \quad \|d\| \leq c_2 \|g\|. \quad (7.3)$$

Seja, agora, $c_3 = c_1/c_2$. Nota-se que as duas condições anteriores implicam que d e $-g$ formam um ângulo suficientemente afastado de $\pi/2$:

$$\cos(-g, d) = \frac{-g^\top d}{\|g\| \|d\|} \geq \frac{c_1}{c_2} = c_3 > 0. \quad (7.4)$$

É sempre possível calcular uma direcção de descida simpléctica ao escolher $d = -g$.

Quando temos disponível uma matriz Hessiana simpléctica indefinida, podemos tentar calcular uma direcção de descida simpléctica com curvatura negativa. Uma direcção de *descida simpléctica com curvatura negativa*, d , calculada num ponto x , é uma direcção de descida simpléctica que satisfaz $d^\top H d < 0$, onde H representa a matriz Hessiana simpléctica calculada em x .

7.2 Um método de procura directa direcciona curvilínea

Um método de procura directa direcciona curvilínea, nos moldes por nós propostos, segue um procedimento de minimização em tudo análogo ao de um método de procura directa direcciona com uma estratégia de globalização baseada em decréscimo suficiente. Contudo, permite o uso de curvas na procura local em torno da iterada corrente, realizada no passo de sondagem. Quando um indicador de descida simpléctico, ι_k , está disponível na iteração k , o passo de sondagem do algoritmo consiste no teste de pontos pertencentes à família de curvas definida por

$$g(\alpha) = g_{\{\iota_k, d\}}(\alpha) = x_k + \alpha^2 \iota_k + \alpha d, \quad \alpha > 0, \quad (7.5)$$

onde d representa uma direcção pertencente ao conjunto gerador positivo D_k . Caso não esteja disponível um indicador de descida, a procura local restringe-se às direcções definidas

pelo conjunto gerador positivo D_k , ao testar pontos da forma $x_k + \alpha d$, com $d \in D_k$ e $\alpha > 0$. O critério para aceitação de um ponto como uma nova iterada do algoritmo baseia-se numa condição de decréscimo suficiente.

De acordo com o que foi dito na Secção 5.1, a qualidade dos indicadores de descida simplécticos, enquanto direcções de descida, depende, de forma directa, da qualidade das derivadas simplécticas utilizadas no seu cálculo. Por sua vez, esta qualidade depende do bom equilíbrio do conjunto de amostragem, usado no cálculo das derivadas simplécticas. De forma a garantir este bom equilíbrio, cada conjunto de amostragem é extraído de uma região de confiança, neste caso interpretada como uma bola fechada $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$, centrada em x_k (a iterada corrente do algoritmo) e de raio Δ_k . O raio Δ_k está directamente relacionado com o comprimento do passo, α_{k-1} , utilizado no último passo de sondagem do algoritmo. Antes do cálculo de um indicador de descida simpléctico, ι_k , é feito um teste ao equilíbrio- Λ do conjunto de amostragem, para uma constante $\Lambda > 0$ relativamente pequena.

Uma descrição esquemática de um método de procura directa direccional curvilínea encontra-se na Figura 7.1, utilizando regras para a actualização do comprimento do passo tão simples quanto possível. Estas regras podem ser mais flexíveis. Em particular, podem adoptar uma estratégia semelhante à descrita na Figura 3.2.

Na Secção 5.1 foram sugeridas algumas estratégias para a gestão dos conjuntos de pontos de amostragem no decurso do processo de minimização, com o objectivo de calcular indicadores de descida baseados em derivadas simplécticas. Estas estratégias foram incorporadas na implementação computacional do algoritmo de procura directa direccional curvilínea. Na análise das propriedades de convergência global do método é apenas necessário impor um limite uniforme à norma dos indicadores de descida, ι_k . Na prática, uma normalização dos vectores permite satisfazer esta condição. Por outro lado, é possível provar que gradientes simplécticos, construídos a partir de conjuntos em equilíbrio- Λ , são uniformemente limitados em norma, desde que a função a avaliar seja contínua à Lipschitz (ver Conn, Scheinberg e Vicente [26, 23]).

7.3 Análise de convergência global do método de procura directa direccional curvilínea

Se a função f for limitada inferiormente, então é possível garantir que a sucessão dos comprimentos do passo gerados pelo algoritmo converge para zero. Este comportamento é uma consequência directa da condição de decréscimo suficiente imposta e da estratégia utilizada na actualização do comprimento do passo.

Teorema 7.3.1. *Seja verdadeira a Hipótese 3.2.1. A sucessão de comprimentos do passo,*

Um Método de Procura Directa Direccional Curvilínea

Inicialização

Escolher $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_0 > 0$, $\Lambda > 0$, $\sigma \geq 1$ e $c > 0$. Escolher um conjunto gerador positivo, D_0 , para $\mathbb{R}^n$. Considerar $k = 0$.

Cálculo de um indicador de descida simpléctico

Para $k > 0$, seja $\Delta_k = \sigma \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|$. Tentar identificar um conjunto de pontos em equilíbrio- Λ , para os quais se conheça o valor da função, contido em $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$ e que inclua x_k . Em caso de sucesso, calcular um indicador de descida simpléctico, ι_k .

Teste ao decréscimo suficiente

Testar a condição de decréscimo suficiente $f(x) < f(x_k) - c \alpha_k^2$, para pontos x da forma:

- $x = x_k + \alpha_k^2 \iota_k + \alpha_k d$, $d \in D_k$, se está disponível um indicador de descida simpléctico na iteração k ;
- $x = x_k + \alpha_k d$, $d \in D_k$, caso contrário.

Assim que se identifique um ponto que satisfaz a condição de decréscimo suficiente, terminar o teste e declarar a iteração como bem sucedida. Caso contrário, declarar a iteração como um insucesso.

Actualização da iterada corrente e do comprimento do passo

Se a iteração foi bem sucedida, então $x_{k+1} = x$ e considerar $\alpha_{k+1} = 2\alpha_k$ ou $\alpha_{k+1} = \alpha_k$. Caso contrário, $x_{k+1} = x_k$ e $\alpha_{k+1} = \alpha_k/2$. Escolher um novo conjunto gerador positivo D_{k+1} para $\mathbb{R}^n$. Incrementar k em uma unidade e regressar ao passo onde é calculado o indicador de descida simpléctico.

Figura 7.1: Um método de procura directa direccional curvilínea.

gerada por um método de procura directa direccional curvilínea, satisfaz

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0. \quad (7.6)$$

Demonstração. Suponhamos que é infinito o conjunto de índices, $\mathcal{S}$, correspondentes a iterações com sucesso. Seja $\{x_k\}$ a sucessão de iteradas gerada por um método de procura directa direccional curvilínea. Se k é uma iteração com sucesso, então $f(x_{k+1}) - f(x_k) < -c \alpha_k^2$. Em iterações sem sucesso $x_{k+1} = x_k$ e como tal $f(x_{k+1}) - f(x_k) = 0$. Assim,

$$f(x_0) - f(x_{n+1}) = \sum_{k=0}^n f(x_k) - f(x_{k+1}) > \sum_{k=0; k \in \mathcal{S}}^n c \alpha_k^2.$$

Como f é limitada inferiormente em $L(x_0)$, a sucessão das somas parciais $S_n = \sum_{k=0; k \in \mathcal{S}}^n c \alpha_k^2$ é convergente, o que implica

$$\lim_{k \in \mathcal{S}} \alpha_k = 0. \quad (7.7)$$

Este limite generaliza-se a qualquer subsucessão de comprimentos do passo gerada pelo algoritmo. Para k' suficientemente grande, índice de uma iteração sem sucesso, consideremos $l_{k'} = \max\{k : k \in \mathcal{S} \text{ e } k < k'\}$. A estratégia utilizada na actualização do comprimento do passo garante que $\alpha_{k'} \leq \frac{\alpha_{l_{k'}}}{2^{k'-l_{k'}-2}}$. Esta desigualdade, em conjunto com o limite (7.7), permite-nos concluir que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \alpha_k = 0.$$

Suponhamos agora que existe um número finito de iterações com sucesso. Se o conjunto das iterações com sucesso é vazio então, para todo o k , $\alpha_k = \frac{\alpha_0}{2^k}$. Caso contrário, seja l o último índice correspondente a uma iteração com sucesso. Para todo o $k > l$, $\alpha_k \leq \frac{\alpha_l}{2^{k-l-2}}$. Em qualquer dos casos obtém-se o resultado pretendido. $\square$

À semelhança do que foi feito no Capítulo 3, para garantir a convergência para um ponto estacionário, da sucessão de iteradas gerada por um método de procura directa direcciona, necessitamos de restringir a escolha dos conjuntos geradores positivos, D_k , não permitindo medidas do coseno demasiado próximas de zero. Os vectores de D_k devem, ainda, ser limitados em norma (inferior e superiormente).

Hipótese 7.3.1. *Existem d_{min} , d_{max} e κ_{min} tais que*

$$0 < d_{min} \leq \|d\| \leq d_{max}, \quad \forall d \in D_k, \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

e

$$\kappa(D_k) \geq \kappa_{min} > 0, \quad \forall k \in \mathbb{N}_0.$$

Esta hipótese é trivialmente satisfeita se D_k for escolhido a partir de um conjunto finito de conjuntos geradores positivos (não contendo o vector nulo).

A demonstração do próximo teorema inspira-se, em parte, na demonstração do Teorema 3.2.3 (ver ainda Kolda, Lewis e Torczon [58]).

Teorema 7.3.2. *Seja $\{x_k\}$ a sucessão de iteradas gerada por um método de procura directa direcciona curvilínea, que utiliza conjuntos geradores positivos, D_k , a satisfazerem a Hipótese 7.3.1.*

Consideremos verdadeiras as Hipóteses 3.2.1 e 3.2.3 e suponhamos, ainda, que o gradiente ∇f é contínuo à Lipschitz num aberto contendo $L(x_0)$, com constante $\gamma_{\nabla f} > 0$.

Se a sucessão de indicadores de descida for limitada, i.e., se existir $M > 0$ tal que $\|\iota_k\| \leq M, \forall k \in \mathbb{N}$, então existe pelo menos uma sucessão infinita de iteradas sem sucesso e

qualquer ponto limite de uma sucessão de iteradas sem sucesso é estacionário, ou seja,

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

Demonstração. Tendo em conta o Teorema 7.3.1 e a estratégia de actualização do comprimento do passo utilizada pelo algoritmo, garante-se a existência de uma subsucessão de iterações sem sucesso, indexada por $\mathcal{N}$, cujos comprimentos do passo convergem para zero (ver a demonstração do Teorema 3.2.4). Seja $k \in \mathcal{N}$ o índice correspondente a uma destas iterações.

Para k suficientemente grande (e consequentemente α_k suficientemente pequeno), se na iteração k do algoritmo não foi possível calcular um indicador de descida, então o Teorema 3.2.3 com $\rho(\alpha) = c\alpha^2$ (ver a equação (3.7)) permite-nos concluir que

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \frac{1}{\kappa(D_k)} \alpha_k \left(\gamma_{\nabla f} d_{\max} + \frac{c}{d_{\min}} \right). \quad (7.8)$$

Suponhamos, agora, que na iteração k o algoritmo calculou um indicador de descida ι_k . Como k é uma iteração sem sucesso,

$$f(x_k + \alpha_k^2 \iota_k + \alpha_k d) \geq f(x_k) - c\alpha_k^2, \quad \forall d \in D_k.$$

Uma vez que D_k é um conjunto gerador positivo, existe $d_k \in D_k$ tal que

$$-\nabla f(x_k)^\top d_k \geq \kappa(D_k) \|\nabla f(x_k)\| \|d_k\|. \quad (7.9)$$

Consideremos a curva de equação $g(\alpha) = x_k + \alpha^2 \iota_k + \alpha d_k$. Então,

$$0 \leq (f \circ g)(\alpha_k) - (f \circ g)(0) + c\alpha_k^2,$$

o que implica

$$0 \leq \nabla f(g(t_k \alpha_k))^\top g'(t_k \alpha_k) \alpha_k + c\alpha_k^2, \quad \text{com } t_k \in (0, 1).$$

Para k suficientemente grande, se dividirmos ambos os lados desta desigualdade por α_k , subtrairmos $-\nabla f(x_k)^\top d_k = -\nabla f(g(0))^\top g'(0)$ a ambos os membros e, depois, somarmos e subtrairmos $\nabla f(g(0))^\top g'(t_k \alpha_k)$ no segundo membro da desigualdade, obtemos

$$\begin{aligned} -\nabla f(x_k)^\top d_k &\leq [\nabla f(g(t_k \alpha_k)) - \nabla f(g(0))]^\top g'(t_k \alpha_k) \\ &\quad + \nabla f(g(0))^\top [g'(t_k \alpha_k) - g'(0)] + c\alpha_k \\ &\leq \gamma_{\nabla f} \|g(t_k \alpha_k) - g(0)\| \|g'(t_k \alpha_k)\| \end{aligned}$$

$$+ \|\nabla f(g(0))\| \|g'(t_k \alpha_k) - g'(0)\| + c \alpha_k.$$

Usando (7.9) vem que

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x_k)\| &\leq \frac{1}{\kappa(D_k)\|d_k\|} \left(\gamma_{\nabla f} \|t_k^2 \alpha_k^2 \iota_k + t_k \alpha_k d_k\| \|2t_k \alpha_k \iota_k + d_k\| \right. \\ &\quad \left. + 2\alpha_k \|\nabla f(x_k)\| \|\iota_k\| + c \alpha_k \right). \end{aligned}$$

Daqui resulta,

$$\begin{aligned} &\left(1 - \frac{2\alpha_k \|\iota_k\|}{\kappa(D_k)\|d_k\|} \right) \|\nabla f(x_k)\| \\ &\leq \frac{1}{\kappa(D_k)\|d_k\|} \left(\gamma_{\nabla f} \|t_k^2 \alpha_k^2 \iota_k + t_k \alpha_k d_k\| \|2t_k \alpha_k \iota_k + d_k\| + c \alpha_k \right). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Sabemos que a subsucessão dos comprimentos do passo $\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{N}}$ converge para zero. Este facto, em conjunto com as desigualdades (7.8) e (7.10), permite obter o resultado pretendido. $\square$

Embora seja desejável utilizar indicadores de descida com boa qualidade, a análise de convergência global desta classe de algoritmos não depende de forma directa dessa qualidade, resultando das propriedades das curvas consideradas. Neste sentido, consideremos uma família de curvas do tipo $\{g_i(\alpha)\}$, $i \in I$ (e finito), que satisfaz

- g_i é uma função continuamente diferenciável em $\mathbb{R}_0^+$.
- g'_i é contínua à Lipschitz em $\mathbb{R}_0^+$.
- Para cada iteração k , existe $I_k \subseteq I$ tal que:

- a) $g_i(0) = x_k, \forall i \in I_k$,
- b) $D_k \subseteq \{g'_i(0), i \in I_k\}$,

onde I_k representa o conjunto de índices correspondentes às curvas utilizadas na iteração k .

Esta família de curvas permite definir um método de procura directa direccionada curvilínea globalmente convergente (no sentido de se verificar o resultado estabelecido no Teorema 7.3.2). A escolha particular do conjunto de curvas (7.5) justifica-se por serem simples e semelhantes às utilizadas em optimização baseada em derivadas, quando se tenta incorporar informação sobre a curvatura da função. Este tipo de curvas possibilita, ainda, um uso directo dos indicadores de descida simplécticos, cuja utilização permite melhorar a eficiência dos métodos de procura directa direccionada (ver o Capítulo 5).

Para as curvas consideradas em (7.5), o resultado de convergência global, formalizado no Teorema 7.3.2, pode generalizar-se a qualquer subsucessão de iteradas gerada pelo algoritmo, desde que se aumente necessariamente o comprimento do passo em iterações com sucesso.

Teorema 7.3.3. *Sejam verdadeiras todas as hipóteses do Teorema 7.3.2 e suponhamos que $\alpha_{k+1} = 2\alpha_k$ em iterações bem sucedidas. Então,*

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

Demonstração. A demonstração é feita por redução ao absurdo e a sua estrutura segue a forma clássica das demonstrações dos algoritmos de regiões de confiança. Suponhamos, então, que existe uma subsucessão de iteradas, $\{x_{k_i}\}$, tal que

$$\|\nabla f(x_{k_i})\| \geq \epsilon > 0, \text{ para todo } i \in \mathbb{N}_0. \quad (7.11)$$

Para cada $i \in \mathbb{N}_0$, o Teorema 7.3.2 garante a existência de uma primeira iteração $l(k_i) = l_i$, tal que

$$\|\nabla f(x_{l_i})\| < \frac{\epsilon}{4}. \quad (7.12)$$

Desta forma, existe uma subsucessão de iteradas, $\{x_{l_i}\}$, tal que

$$\|\nabla f(x_k)\| \geq \frac{\epsilon}{4}, \text{ para } k_i \leq k < l_i \text{ e} \quad (7.13)$$

$$\|\nabla f(x_{l_i})\| < \frac{\epsilon}{4},$$

para i suficientemente grande.

Seja $\mathcal{K} = \bigcup_{i \in \mathbb{N}_0} \{k \in \mathbb{N}_0 : k_i \leq k < l_i\}$. Começamos por provar que todas as iterações $k \in \mathcal{K}$ são bem sucedidas, para $k \in \mathcal{K}$ suficientemente grande. Para o efeito, suponhamos que existia uma subsucessão indexada em $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{K}$ de iterações sem sucesso. Neste caso, ao tomarmos o limite em (7.8) e (7.10), para $k \in \mathcal{L}$, viria, de (7.6), que $\{\|\nabla f(x_k)\|\}_{k \in \mathcal{L}}$ convergiria para zero, o que contradiz (7.13).

Como todas as iteradas com sucesso, x_k , satisfazem a condição de decréscimo suficiente $f(x_{k+1}) - f(x_k) < -c\alpha_k^2$, temos, para i suficientemente grande,

$$f(x_{k_i}) - f(x_{l_i}) = \sum_{j=k_i}^{l_i-1} f(x_j) - f(x_{j+1}) > \sum_{j=k_i}^{l_i-1} c\alpha_j^2. \quad (7.14)$$

Por outro lado, sabemos que

$$\|x_{l_i} - x_{k_i}\| \leq \sum_{j=k_i}^{l_i-1} \|x_j - x_{j+1}\| \leq \sum_{j=k_i}^{l_i-1} d_{max} \alpha_j + \sum_{j=k_i}^{l_i-1} M \alpha_j^2. \quad (7.15)$$

De (7.14) concluimos, pelo facto de f ser limitada inferiormente, que

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} \sum_{j=k_i}^{l_i-1} \alpha_j^2 = 0 \quad (7.16)$$

(pois $\lim_{i \rightarrow +\infty} f(x_{k_i}) = \lim_{i \rightarrow +\infty} f(x_{l_i})$).

Para i suficientemente grande, como todas as iterações em $\mathcal{K}$ são bem sucedidas, tendo em conta a forma de actualização de α_k nestas iterações, vem que

$$\sum_{j=k_i}^{l_i-1} \alpha_j = \sum_{j=k_i}^{l_i-1} \left(\frac{1}{2}\right)^{l_i-1-j} \alpha_{l_i-1} = \alpha_{l_i-1} \left(\frac{1}{2}\right)^{l_i-1-k_i} \frac{1 - (1/2)^{l_i-k_i}}{1 - (1/2)} \leq \alpha_{l_i-1} \frac{1}{1 - (1/2)} = 2\alpha_{l_i-1}.$$

Logo, usando (7.6), conclui-se que

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} \sum_{j=k_i}^{l_i-1} \alpha_j = 0. \quad (7.17)$$

Utilizando agora (7.16) e (7.17) obtemos (ver (7.15))

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} \|x_{l_i} - x_{k_i}\| = 0. \quad (7.18)$$

O limite (7.18) permite-nos considerar a norma $\|x_{l_i} - x_{k_i}\|$ tão pequena quanto se queira. Desta forma, para i suficientemente grande, tem-se, recorrendo à continuidade à Lipschitz do gradiente ∇f e a (7.12), que

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x_{k_i})\| &\leq \|\nabla f(x_{l_i}) - \nabla f(x_{k_i})\| + \|\nabla f(x_{l_i})\| \\ &\leq \gamma_{\nabla f} \|x_{l_i} - x_{k_i}\| + \|\nabla f(x_{l_i})\| \\ &< \frac{\epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4} = \frac{\epsilon}{2}, \end{aligned}$$

o que contradiz (7.11). O teorema fica, assim, demonstrado. $\square$

7.4 Um método híbrido de procura directa e unidireccional

Uma iteração do novo algoritmo consiste numa procura unidireccional, usando uma direcção de descida simpléctica, ou num passo de sondagem de um método de procura directa direccional. A escolha depende de uma comparação entre o raio da região de confiança considerada para o cálculo da direcção de descida simpléctica e a norma do gradiente simpléctico.

A convergência global do algoritmo pode resultar apenas da aplicação de um dos dois tipos de passos considerados. Assim, pode dar-se o caso de apenas se aplicarem passos baseados em direcções de descida simpléctica, pelo que é necessário assegurar a qualidade destas direcções. De acordo com o que foi referido na Subsecção 4.1.3, tal equivale a monitorizar e melhorar a qualidade da geometria do conjunto de amostragem utilizado no cálculo das derivadas simplécticas. A nova classe de algoritmos é descrita na Figura 7.2.

O cálculo de uma direcção de descida simpléctica foi descrito na Secção 7.1. A condição de decréscimo suficiente é diferente da descrita no Capítulo 4. O objectivo é incluir um termo de segunda ordem que incorpore o decréscimo ao longo de uma direcção de descida simpléctica de curvatura negativa. A nova condição toma a forma

$$f(x_k + \beta \iota_k) < f(x_k) + c [\beta g_k^\top \iota_k + (\beta^2/2) \iota_k^\top H_k \iota_k]. \quad (7.19)$$

Quando se calcula apenas uma direcção de descida simpléctica, e não uma direcção de descida simpléctica com curvatura negativa, não existe a garantia de que a quantidade $\iota_k^\top H_k \iota_k$ seja negativa. Assim, quando $\iota_k^\top H_k \iota_k \geq 0$, consideramos $H_k = 0$ e a condição de decréscimo suficiente (7.19) toma a forma mais simplificada

$$f(x_k + \beta \iota_k) < f(x_k) + c \beta g_k^\top \iota_k. \quad (7.20)$$

A grande diferença entre o método híbrido de procura directa e unidireccional e os algoritmos de procura unidireccional baseados em gradientes simplécticos, descritos no Capítulo 4, reside no facto do algoritmo híbrido apenas seleccionar o procedimento de procura unidireccional se o raio da região de confiança (que contém o conjunto de amostragem utilizado no cálculo das derivadas simplécticas) for pequeno, relativamente à norma do gradiente simpléctico calculado. Caso contrário, o algoritmo executa um passo de sondagem, explorando as direcções de um conjunto gerador positivo. Por outro lado, à semelhança do que é feito no método de procura unidireccional de Conn, Scheinberg e Vicente [24], descrito na Secção 4.2, o procedimento de procura unidireccional (*backtrack*) é aplicado de forma cautelosa. Após um número finito (j_{actual}) de passos de *backtrack*, se a procura unidireccional tiver falhado, então a geometria do conjunto de amostragem é verificada e, possivelmente,

Um Método Híbrido de Procura Directa e Unidireccional

Inicialização

Escolher $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_0 > 0$, $\Lambda > 0$, $\sigma \geq 1$, $0 < c, \tau < 1$ e $j_{max} \in \mathbb{N}$. Escolher um conjunto gerador positivo, D_0 , para $\mathbb{R}^n$. Considerar $k = 0$.

Cálculo das derivadas simplécticas

Para $k > 0$, seja $\Delta_k = \sigma \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|$. Tentar identificar um conjunto de pontos em equilíbrio- Λ , para os quais se conheça o valor da função, contido em $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$ e que inclua x_k . Em caso de sucesso, calcular um gradiente simpléctico, g_k , e, possivelmente, uma Hessiana simpléctica, H_k . Considerar $j_{actual} = j_{max}$ e $\xi = 1$. Caso não se consiga identificar um conjunto em equilíbrio- Λ , considerar $g_k = 0$.

Passo de procura unidireccional (Só executar este passo se $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$)

- *Cálculo de uma direcção de descida simpléctica*
Calcular uma direcção de descida simpléctica, ι_k , usando as derivadas simplécticas g_k e H_k . Se ι_k não for uma direcção de descida simpléctica de curvatura negativa, então considerar $H_k = 0$.
- *Teste ao decréscimo suficiente*

(A) Para $j = 0, 1, 2, \dots, j_{actual}$

- * Considerar $\beta = \tau^j$ e avaliar f em $x_k + \beta \iota_k$.
- * Se se verifica a condição de decréscimo suficiente

$$f(x_k + \beta \iota_k) < f(x_k) + c \left[\beta g_k^\top \iota_k + (\beta^2/2) \iota_k^\top H_k \iota_k \right],$$

então terminar o passo de procura unidireccional, declarar a iteração como bem sucedida e considerar $x_{k+1} = x_k + \beta \iota_k$.

(B) Se a procura unidireccional não foi bem sucedida, então dividir ξ por dois e, se necessário, melhorar a geometria do conjunto de pontos usado no cálculo das derivadas simplécticas até que o conjunto de amostragem esteja em equilíbrio- Λ em $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$, para $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$. Incrementar j_{actual} em uma unidade e repetir o passo de procura unidireccional.

Passo de sondagem

Se $\Delta_k > \|g_k\|$, então testar a condição de decréscimo suficiente $f(x_k + \alpha_k d) < f(x_k) - c(\alpha_k \|d\|)^2$ para $d \in D_k$. Se se identificar uma direcção, d_k , tal que a condição de decréscimo suficiente é satisfeita, então parar o teste, considerar $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e declarar a iteração como bem sucedida. Caso contrário, declarar a iteração como um insucesso e considerar $x_{k+1} = x_k$.

Actualização do comprimento do passo

Se a iteração foi bem sucedida, então considerar $\alpha_{k+1} = \alpha_k$ ou $\alpha_{k+1} = 2\alpha_k$. Caso contrário, $\alpha_{k+1} = \alpha_k/2$. Escolher o conjunto gerador positivo D_{k+1} a utilizar na iteração $k + 1$. Incrementar k em uma unidade e regressar ao cálculo das derivadas simplécticas.

Figura 7.2: Um método híbrido de procura directa e unidireccional.

melhorada numa região de confiança de raio proporcional à dimensão do gradiente simpléctico ($\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$), mas para um valor de ξ menor. Este procedimento é fundamental na análise de convergência global do algoritmo, embora a sua implementação prática possa tomar uma forma mais ligeira, a fim de melhorar o desempenho numérico do método. É ainda importante notar que no decorrer deste processo (descrito em (B) na Figura 7.2) o gradiente simpléctico g_k e a Hessiana simpléctica H_k podem ser recalculados, alterando igualmente ι_k . O próprio valor de Δ_k , ao ser alterado, deixa de seguir a regra $\Delta_k = \sigma \alpha_{k-1} \max_{d \in D_{k-1}} \|d\|$ do princípio da iteração. O processo de encontrar Δ_k , g_k e H_k a satisfazerem $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$ pode ser do tipo descrito na demonstração do Lema 4.2.1.

7.5 Análise de convergência global do algoritmo híbrido de procura directa e unidireccional

Começamos por mostrar que é possível satisfazer a condição de decréscimo suficiente num número finito de passos de *backtrack*. Para tal, é necessário supor que é possível identificar um conjunto em equilíbrio- Λ , executando apenas um número finito de passos de melhoramento do conjunto de amostragem utilizado no cálculo das derivadas simplécticas. Consequentemente, será verdadeiro um dos limites no erro das derivadas simplécticas expressos nas desigualdades (7.1) ou (7.2). Por um passo de melhoramento do conjunto de amostragem entenda-se a substituição de um dos pontos do conjunto. Conn, Scheinberg e Vicente [26] propuseram algoritmos para a implementação destes passos de melhoramento, que garantem a validade da hipótese seguinte.

Hipótese 7.5.1. *Para qualquer valor de $\Delta_k > 0$, uma das condições (7.1) ou (7.2) pode ser satisfeita após um número finito de melhoramentos da geometria do conjunto de amostragem.*

O próximo resultado, em conjunto com o Lema 4.2.1¹, garante a finidade do procedimento de *backtrack* utilizado na verificação da condição de decréscimo suficiente.

Lema 7.5.1. *Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, cuja Hessiana $\nabla^2 f$ é limitada em $\mathbb{R}^n$ e seja $M_{\nabla^2 f} > 0$ a respectiva constante. Suponhamos verdadeira a Hipótese 7.5.1. Em qualquer ponto não estacionário, x_k , resultante do passo de procura unidireccional do método híbrido de procura directa e unidireccional, a condição de decréscimo suficiente é satisfeita para todos os β e ξ tais que*

$$0 < \beta < \min \left(\frac{c_3(1-c) - \xi \kappa_{eg}}{M_{\nabla^2 f} c_2}, \frac{2c_3(1-c) - 2\xi \kappa_{eg} \bar{\Delta}}{2M_{\nabla^2 f} c_2 + \bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2} \right) \quad (7.21)$$

¹A demonstração deste lema é facilmente adaptada ao caso (7.2) em que $\|\nabla f(x) - g\| \leq \kappa_{egH} \Delta^2$.

e

$$0 < \xi < \frac{c_3(1-c)}{\max(\kappa_{eg}, \kappa_{egH}\bar{\Delta})}, \quad (7.22)$$

onde $\bar{\Delta}$ representa um limite superior para a sucessão dos raios das regiões de confiança consideradas pelo método e κ_{eg} , κ_{egH} e κ_{eH} são as constantes dos erros em (7.1) e (7.2).

Desta forma, o procedimento de backtrack termina após um número finito de reduções de β e ξ e um número finito de tentativas de melhorar a geometria do conjunto de amostragem.

Demonstração. Devemos considerar dois casos distintos, consoante a condição de decréscimo suficiente inclua ou não um termo relativo a $H_k \neq 0$.

Suponhamos que ι_k não é uma direcção de descida simpléctica de curvatura negativa. Então H_k é tomada como a matriz nula e a condição de decréscimo suficiente apresenta a forma (7.20). Aplicando o teorema do valor médio, utilizando o limite do erro no gradiente simpléctico (7.1), as condições (7.3)–(7.4) e a desigualdade $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$, deduzimos, com $t_k \in (0, 1)$, que

$$\begin{aligned} f(x_k + \beta \iota_k) - f(x_k) &= \beta \nabla f(x_k + t_k \beta \iota_k)^\top \iota_k \\ &= \beta [\nabla f(x_k + t_k \beta \iota_k) - \nabla f(x_k)]^\top \iota_k + \beta [\nabla f(x_k) - g_k]^\top \iota_k + \beta g_k^\top \iota_k \\ &\leq \beta^2 M_{\nabla^2 f} \|\iota_k\|^2 + \beta \kappa_{eg} \Delta_k \|\iota_k\| + \beta g_k^\top \iota_k \\ &\leq \beta^2 M_{\nabla^2 f} \frac{c_2}{c_3} (-g_k^\top \iota_k) + \beta \kappa_{eg} (\xi \|g_k\|) \|\iota_k\| + \beta g_k^\top \iota_k \\ &\leq \left(-\beta \frac{M_{\nabla^2 f} c_2}{c_3} - \xi \frac{\kappa_{eg}}{c_3} + 1 \right) \beta g_k^\top \iota_k. \end{aligned}$$

Assim, a condição de decréscimo suficiente verifica-se desde que

$$-\beta \frac{M_{\nabla^2 f} c_2}{c_3} - \xi \frac{\kappa_{eg}}{c_3} + 1 > c \iff \beta < \frac{c_3(1-c) - \xi \kappa_{eg}}{M_{\nabla^2 f} c_2} \text{ e } \xi < \frac{c_3(1-c)}{\kappa_{eg}}. \quad (7.23)$$

Suponhamos, agora, que ι_k é uma direcção de descida simpléctica com curvatura negativa. Neste caso, a condição de decréscimo suficiente a satisfazer é (7.19). Para mostrar o resultado, consideremos uma expansão quadrática de Taylor, os limites do erro nas derivadas simplécticas (7.2) e a desigualdade $\Delta_k \leq \bar{\Delta}$, para todo o k . Alguns passos são análogos aos utilizados na primeira parte da demonstração, pelo que são omitidos. Assim sendo, tem-se, com $t_k \in (0, 1)$, que

$$\begin{aligned} f(x_k + \beta \iota_k) - f(x_k) &= \beta \nabla f(x_k)^\top \iota_k + \frac{\beta^2}{2} \iota_k^\top \nabla^2 f(x_k + t_k \beta \iota_k) \iota_k \\ &= \beta [\nabla f(x_k) - g_k]^\top \iota_k + \beta g_k^\top \iota_k + \frac{\beta^2}{2} \iota_k^\top [\nabla^2 f(x_k + t_k \beta \iota_k)] \iota_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\nabla^2 f(x_k)]\iota_k + \frac{\beta^2}{2}\iota_k^\top [\nabla^2 f(x_k) - H_k]\iota_k + \frac{\beta^2}{2}\iota_k^\top H_k \iota_k \\
& \leq \beta \kappa_{egH} \Delta_k^2 \|\iota_k\| + \beta g_k^\top \iota_k + \beta^2 M_{\nabla^2 f} \|\iota_k\|^2 + \frac{\beta^2}{2} \Delta_k \kappa_{eH} \|\iota_k\|^2 \\
& \quad + \frac{\beta^2}{2} \iota_k^\top H_k \iota_k \\
& \leq \beta \kappa_{egH} (\bar{\Delta} \xi \|g_k\|) \|\iota_k\| + \beta g_k^\top \iota_k + \beta^2 M_{\nabla^2 f} c_2 \|\iota_k\| \|g_k\| \\
& \quad + \frac{\beta^2}{2} \bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2 \|\iota_k\| \|g_k\| + \frac{\beta^2}{2} \iota_k^\top H_k \iota_k \\
& \leq \left(-\xi \frac{\kappa_{egH} \bar{\Delta}}{c_3} + 1 - \beta \frac{M_{\nabla^2 f} c_2}{c_3} - \frac{\beta}{2} \frac{\bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2}{c_3} \right) \beta g_k^\top \iota_k + \frac{\beta^2}{2} \iota_k^\top H_k \iota_k.
\end{aligned}$$

A condição de decréscimo suficiente será satisfeita desde que

$$-\xi \frac{\kappa_{egH} \bar{\Delta}}{c_3} + 1 - \beta \frac{M_{\nabla^2 f} c_2}{c_3} - \frac{\beta}{2} \frac{\bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2}{c_3} > c$$

o que equivale a

$$\beta < \frac{2c_3(1-c) - 2\xi \kappa_{egH} \bar{\Delta}}{2M_{\nabla^2 f} c_2 + \bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2} \quad \text{e} \quad \xi < \frac{c_3(1-c)}{\kappa_{egH} \bar{\Delta}}. \quad (7.24)$$

Os limites para β e ξ em (7.21) e (7.22) resultam de (7.23) e (7.24).

Como x_k não é um ponto estacionário, o Lema 4.2.1 garante que é finito o número de reduções de Δ_k e de tentativas de melhorar o conjunto de amostragem de forma a garantir que é satisfeito um dos limites do erro nas derivadas simpléticas (7.1) ou (7.2), em $\mathcal{B}(x_k; \Delta_k)$, para $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$, no processo descrito em (B) na Figura 7.2. A demonstração finaliza-se notando que (7.21) e (7.22) implicam um número finito de reduções de β e de ξ . $\square$

O limite superior, $\bar{\Delta}$, para Δ_k pode ser assegurado através de $\alpha_{k+1} = \min(2\alpha_k, \bar{\alpha})$, nos casos em que se queira aumentar α_k em iterações com sucesso (com $\bar{\alpha} > 0$ independente de k).

Como resultado do Lema 7.5.1 e da estratégia para actualizar o valor de β , podemos garantir que β_k é limitado inferiormente por

$$\beta_k \geq \bar{\beta} = \min \left(\frac{c_3(1-c) - \bar{\xi} \kappa_{eg}}{M_{\nabla^2 f} c_2}, \frac{2c_3(1-c) - 2\bar{\xi} \kappa_{egH} \bar{\Delta}}{2M_{\nabla^2 f} c_2 + \bar{\Delta} \kappa_{eH} c_2} \right) \tau, \quad (7.25)$$

onde $\bar{\xi}$ é um número positivo a satisfazer

$$\bar{\xi} < \frac{c_3(1-c)}{\max(\kappa_{eg}, \kappa_{egH} \bar{\Delta})}.$$

Analogamente ao que foi feito na análise de convergência global do método de procura directa direcciona curvilínea (ver a Secção 7.3), vamos supor que as direcções que constituem

os conjuntos geradores positivos são limitadas em norma (inferior e superiormente) e que a medida do coseno destes conjuntos geradores positivos é suficientemente afastada de zero (Hipótese 7.3.1). Estamos, agora, em condições de estabelecer a convergência global do método híbrido de procura directa e unidireccional.

Teorema 7.5.1. *Seja $\{x_k\}$ uma sucessão de iteradas gerada por um algoritmo híbrido de procura directa e unidireccional, que utiliza conjuntos geradores positivos, D_k , a satisfazer a Hipótese 7.3.1.*

Seja f uma função duas vezes continuamente diferenciável em $\mathbb{R}^n$, cuja Hessiana $\nabla^2 f$ é limitada em $\mathbb{R}^n$ e seja $M_{\nabla^2 f} > 0$ a respectiva constante. Suponhamos, ainda, verdadeiras as Hipóteses 3.2.1 e 7.5.1.

Então,

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

Demonstração. Suponhamos que existe uma sucessão infinita de iterações com sucesso. Nesta situação, devem analisar-se dois casos distintos:

- Existe uma subsucessão de iterações com sucesso tal que

$$f(x_{k+1}) < f(x_k) + c [\beta_k g_k^\top \iota_k + (\beta_k^2/2) \iota_k^\top H_k \iota_k].$$

- Existe uma subsucessão de iterações com sucesso tal que

$$f(x_{k+1}) < f(x_k) - c(\alpha_k \|d_k\|)^2. \quad (7.26)$$

No primeiro caso, uma vez que f é limitada inferiormente em $L(x_0)$, a condição de decréscimo suficiente garante que existe uma subsucessão de iterações com sucesso, indexada pelo conjunto $\mathcal{S}$, tal que

$$\lim_{k \in \mathcal{S}} \beta_k g_k^\top \iota_k + (\beta_k^2/2) \iota_k^\top H_k \iota_k = 0.$$

Uma vez que ι_k é uma direcção de descida simpléctica com curvatura negativa ou que $H_k = 0$, concluímos que

$$\lim_{k \in \mathcal{S}} \beta_k g_k^\top \iota_k = 0 \quad \text{e} \quad \lim_{k \in \mathcal{S}} (\beta_k^2/2) \iota_k^\top H_k \iota_k = 0.$$

Usando o limite inferior definido em (7.25) temos que

$$\lim_{k \in \mathcal{S}} g_k^\top \iota_k = 0.$$

Sabemos que ι_k é uma direcção de descida simpléctica, logo $g_k^\top \iota_k \leq -c_1 \|g_k\|^2$, para todo o k .

Daqui se conclui que

$$\lim_{k \in S} \|g_k\| = 0.$$

Os limites do erro nas derivadas simplécticas, expressos nas desigualdades (7.1) ou (7.2), em conjunto com o facto de $\Delta_k \leq \xi \|g_k\|$, para algum $\xi \in (0, 1]$ e para todo o k , garantem que

$$\lim_{k \in S} \|\nabla f(x_k)\| = 0.$$

Consideremos, agora, o caso em que existe uma subsucessão de iterações com sucesso a satisfazer (7.26). O Teorema 3.2.1, com $\rho(\alpha_k) = c(\alpha_k \|d_k\|)^2$, garante a existência de uma subsucessão de comprimentos do passo a convergir para zero. A estratégia de actualização do comprimento do passo garante a existência de uma subsucessão de iterações sem sucesso, com índices no conjunto $\mathcal{N}$, para a qual a correspondente sucessão de comprimentos do passo converge para zero (ver a demonstração do Teorema 3.2.4).

Aplicando o Teorema 3.2.3 (equação (3.5)), com $\rho(\alpha_k) = c(\alpha_k \|d_k\|)^2$, obtém-se

$$\|\nabla f(x_k)\| \leq \frac{1}{\kappa(D_k)} \alpha_k (M_{\nabla^2 f} + c) d_{\max}, \quad \forall k \in \mathcal{N}.$$

Como $\{\alpha_k\}$ converge para zero em $\mathcal{N}$, vem que

$$\lim_{k \in \mathcal{N}} \|\nabla f(x_k)\| = 0.$$

Para finalizar a demonstração, é necessário considerar o caso em que existe apenas um número finito de iterações com sucesso. Nesta situação, $\{\alpha_k\}$ converge para zero e $x_k = \bar{x}$ a partir de uma certa ordem. Recorrendo novamente ao Teorema 3.2.3, com $\rho(\alpha_k) = c(\alpha_k \|d_k\|)^2$, concluir-se-ia que $\nabla f(\bar{x}) = 0$. $\square$

Capítulo 8

Breve introdução aos métodos de procura directa direccional para problemas com restrições

Consideremos agora um problema de optimização não linear com restrições, escrito na forma

$$\min_{x \in \Omega} f(x) \tag{8.1}$$

onde $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ é uma função definida em Ω . Um número significativo de algoritmos de OSD que lidam com restrições geram apenas iteradas admissíveis (ou seja, iteradas que satisfazem as restrições impostas). Como foi referido no Capítulo 2, o objectivo de um utilizador, quando aplica um algoritmo de optimização a um problema de OSD, não passa necessariamente pela determinação de um minimizante local ou global, dado o custo envolvido no seu cálculo. Em muitos casos, considera-se suficiente um melhoramento significativo do valor previamente conhecido para a função objectivo. A admissibilidade das iteradas geradas pelo algoritmo, ao longo do processo de optimização, permite que este seja interrompido a partir do momento em que o utilizador considere o valor da função objectivo como aceitável. Por outro lado, não existe a garantia de que a função objectivo esteja definida fora da região admissível do problema.

Existem várias metodologias para resolver problemas com restrições em Optimização Não Linear. Uma abordagem popular, nos anos 60 e 70, para lidar com restrições não lineares, mas que encontra aplicação actual em OSD, consiste na utilização de funções de penalidade e de barreira. Os algoritmos baseados em funções de penalidade permitem gerar iteradas não admissíveis, adicionando à função objectivo um termo envolvendo, tipicamente, o produto de um parâmetro de penalidade por uma medida de não admissibilidade. Nas funções de barreira, o termo que é adicionado à função objectivo tem uma composição diferente. Neste

caso, é adicionada uma função (multiplicada por um parâmetro de barreira), que se aproxima do valor $+\infty$ quando pontos estritamente admissíveis se aproximam da fronteira da região admissível. Desta forma, os métodos baseados em funções de barreira geram sempre iteradas admissíveis.

Como foi referido, em OSD é conveniente que um algoritmo gere sempre iteradas que satisfaçam as restrições do problema, o que justifica a utilização de uma função de barreira. A função de barreira utilizada em OSD (e, em particular, na procura directa direccionada) tem uma composição diferente das funções de barreira clássicas. Os algoritmos são aplicados, não à função f , mas à função de barreira, f_Ω , definida por

$$f_\Omega(x) = \begin{cases} f(x), & \text{se } x \in \Omega, \\ +\infty, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (8.2)$$

A função de barreira pode ainda ser escrita como $f_\Omega = f + \Psi_\Omega$, em que Ψ_Ω é a função indicatriz de Ω (que vale zero em Ω e $+\infty$ caso contrário). Resulta desta definição que não é necessário avaliar a função objectivo em pontos não admissíveis. Em vez disso, é atribuído o valor $+\infty$ à função de barreira, algo compatível com os métodos de procura directa que se baseiam apenas em comparações entre os valores da função.

Os métodos de procura directa direccionada para optimização sem restrições, descritos no Capítulo 3, são directamente aplicáveis à minimização de f_Ω . Contudo, a técnica de barreira não pode ser aplicada recorrendo a um conjunto gerador positivo arbitrário. De facto, encontrar uma direcção que diste, em amplitude, menos de 90° da direcção de descida máxima, não é o suficiente para garantir a convergência global na presença de restrições. A exigência de admissibilidade pode inviabilizar um passo que garantiria decréscimo do valor da função objectivo. As direcções a explorar devem reflectir a geometria da região admissível em torno da iterada corrente do algoritmo.

No caso das restrições consistirem apenas de limites aos valores das variáveis, o conjunto gerador positivo formado pelas direcções coordenadas e os seus simétricos reflecte adequadamente a geometria da região admissível. Desta forma, um algoritmo de procura directa direccionada, quando aplicado à minimização da função (8.2), que considere sempre no passo de sondagem este conjunto gerador positivo, apresenta convergência global para pontos estacionários de primeira ordem do problema (8.1) (ver Lewis e Torczon [64]).

Na presença de restrições mais gerais, mas para as quais se conheça o valor das derivadas, é necessário identificar as restrições activas, ou quase activas, de forma a construir um conjunto de geradores positivos adequado. Seja $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) \leq 0, \forall i = 1, \dots, m\}$. Dados $x \in \Omega$ e $\epsilon > 0$, define-se o conjunto dos índices das restrições ϵ -activas no ponto x por $I(x; \epsilon) = \{i \in \{1, \dots, m\} : c_i(x) \geq -\epsilon\}$. Se as restrições forem lineares, após um escalonamento adequado da matriz que define as restrições, constata-se que uma restrição

é ϵ -activa no ponto x se e só se a distância de x ao hiperplano que define a restrição não excede ϵ .

Suponhamos, numa primeira abordagem, que é possível calcular as derivadas das funções que definem as restrições do problema. Dado $x \in \Omega$, designa-se por $N(x; \epsilon)$ o cone gerado não negativamente pelos vectores $\nabla c_i(x)$, com $i \in I(x; \epsilon)$. O seu cone polar, designado por $T(x; \epsilon)$, é definido como

$$T(x; \epsilon) = \{v : w^\top v \leq 0, \forall w \in N(x; \epsilon)\}.$$

Para escolhas adequadas de ϵ e na presença de uma qualificação de restrições, $x + T(x; \epsilon)$ aproxima a geometria da região admissível em torno de x . Esta propriedade garante que um algoritmo pode percorrer uma distância de ϵ a partir de x ao longo de qualquer direcção em $T(x; \epsilon)$ mantendo a admissibilidade. Nota-se que $N(x; 0)$ é o cone normal definido em x e $T(x; 0)$ é o respectivo cone tangente (se, por exemplo, os gradientes das funções que definem as restrições activas forem linearmente independentes).

Se na iteração k tivermos $N(x_k; \epsilon) = \{0\}$ então $T(x_k; \epsilon) = \mathbb{R}^n$, o que faz com que o problema possa ser visto, localmente, como um problema sem restrições. Num contexto de métodos de procura directa direccionada, esta propriedade significa que no passo de sondagem do algoritmo é suficiente considerar um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$. No caso em que $N(x_k; \epsilon) \neq \{0\}$ várias estratégias podem ser usadas para a construção do conjunto de direcções a considerar no passo de sondagem, desde que se garanta que o conjunto de direcções escolhidas reflecta a geometria da região admissível em torno de x_k . Foram propostas algumas abordagens, em que

- D_k contém geradores positivos para todos os cones $T(x_k; \epsilon)$, qualquer que seja o $\epsilon \in [0, \epsilon_*]$, onde $\epsilon_* > 0$ é independente de k (ver Lewis e Torczon [65]);
- D_k é um conjunto gerador positivo para o cone $T(x_k; \epsilon_k)$, onde $\epsilon_k = d_{max} \alpha_k$, com d_{max} uma constante independente de k tal que $\|d_k\| \leq d_{max}, \forall d_k \in D_k$ (ver Lewis, Shepherd e Torczon [62] e Kolda, Lewis e Torczon [60]);
- D_k é um conjunto gerador positivo para o cone $T(x_k; \epsilon_k)$, onde ϵ_k é actualizado apenas nas iterações mal sucedidas e é utilizada uma estratégia de globalização baseada na imposição de uma condição de decréscimo suficiente (ver Lucidi, Sciandrone e Tseng [70]).

Quando os geradores de $N(x_k; \epsilon_k)$ são linearmente independentes, algoritmos para a construção de geradores de $T(x_k; \epsilon_k)$ encontram-se descritos em [62, 65, 70]. O caso de restrições lineares degeneradas é abordado por Lewis, Shepherd e Torczon [62] e por Abramson, Brezhneva, Dennis e Pingel [5]. O caso degenerado coloca desafios computacionais adicionais, quando o número de restrições não redundantes é elevado.

No caso de restrições lineares, a sucessão de iteradas gerada por um método de procura directa direccionada apresenta um ponto limite que satisfaz as condições necessárias de primeira ordem para o problema (8.1) (ver Lewis e Torczon [65] e Kolda, Lewis e Torczon [60]). Quando as restrições do problema são gerais, mas ainda no contexto de derivadas conhecidas, são necessárias algumas hipóteses adicionais sobre a regularidade das restrições para permitir obter um resultado análogo de convergência global de primeira ordem (ver Lucidi, Sciandrone e Tseng [70]). Neste caso, a estratégia de globalização baseia-se numa condição de decréscimo suficiente.

Para o caso em que as derivadas (das restrições que definem a região admissível do problema) não estão disponíveis, Lewis e Torczon [66] sugeriram uma abordagem baseada na função de Lagrangeano aumentado, generalizada em Kolda, Lewis e Torczon [59]. As restrições que não são lineares são incorporadas na função Lagrangeana aumentada, sendo a solução do problema obtida através da resolução (aproximada) de uma sucessão de subproblemas de Lagrangeano aumentado, sujeitos às restantes restrições. Este método apresenta propriedades de convergência global para pontos estacionários de primeira ordem, embora ainda não existam estudos que viabilizem a sua utilização numérica.

Liuzzi e Lucidi [68] desenvolveram e analisaram um algoritmo baseado numa função de penalidade exacta mas não suave, impondo uma condição de decréscimo suficiente para a redução do seu valor. Nesta função penalidade não são incluídas as restrições lineares. O método proposto apresenta propriedades de convergência global para pontos estacionários de primeira ordem.

Com o objectivo de lidar com restrições gerais, Audet e Dennis [10] propuseram a aplicação de um método de filtro. A técnica de filtro foi desenvolvida recentemente, por Fletcher e Leyffer [43] (ver o resumo elaborado por Fletcher, Leyffer e Toint [44]), para globalizar algoritmos de optimização não linear com restrições. De uma forma grosseira, esta metodologia encara um problema com restrições como um problema de optimização bi-objectivo, que tenta minimizar simultaneamente a função objectivo e uma medida da violação das restrições, dando alguma prioridade ao segundo objectivo. Recorrendo à análise de Clarke [18], Audet e Dennis [10] mostraram, para o seu algoritmo de procura directa direccionada baseado em filtros, a convergência de uma subsucessão das iteradas geradas pelo algoritmo para um ponto que satisfaz as condições necessárias de primeira ordem de um problema relacionado com o problema original. Esta discrepância nos resultados de convergência global obtidos resulta do número de direcções de procura ser finito.

Num contexto de restrições continuamente diferenciáveis mas cujos gradientes não estão disponíveis (sendo aproximados), Dennis, Price e Coope [34] permitiram o uso de um número infinito de direcções de procura, embora tenham seguido igualmente uma abordagem de filtro. Sob a hipótese de diferenciabilidade estrita da função objectivo, num ponto limite da

sucessão de iteradas gerada pelo algoritmo, garante-se a convergência global para um ponto estacionário do problema original. Neste trabalho, o conceito de envelope de um filtro é usado como forma de impor uma condição de decréscimo suficiente para o valor da função.

Este trabalho foi generalizado através do método de procura directa com grelha adaptável de Audet e Dennis [11], descrito na Secção 3.3, que utiliza um conjunto de direcções de sondagem cuja união é assintoticamente densa em $\mathbb{R}^n$. Este algoritmo é aplicável a problemas com restrições gerais, com ou sem derivadas conhecidas, incluindo o caso em que as restrições funcionam como se tratasse de um oráculo, como acontece com alguns códigos que apenas retornam sim ou não como resposta à verificação da admissibilidade de um ponto. Um trabalho mais recente combina a procura directa com grelha adaptável e conceitos relacionados com a abordagem de filtro (ver Audet e Dennis [12]).

Capítulo 9

Resolução de dois problemas aplicados

De acordo com o que foi referido no Capítulo 2, uma das grandes motivações para o desenvolvimento de algoritmos de OSD e, em particular, para o desenvolvimento dos métodos de procura directa direccional é o elevado número de aplicações científicas e industriais onde surgem problemas passíveis de resolução por aplicação de algoritmos pertencentes a esta classe.

Neste capítulo descrevemos, de forma sucinta, duas aplicações onde a procura directa direccional assume um papel de relevância na melhoria das soluções conhecidas. A Secção 9.1 descreve um problema de Mecânica Computacional, resultante da simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. A Secção 9.2 respeita à calibração de parâmetros estelares em Astrofísica. Na resolução de ambos os problemas foram consideradas estratégias baseadas em derivadas simplécticas, com o objectivo de melhorar a eficiência da procura directa direccional.

9.1 Simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito

9.1.1 Uma descrição resumida do problema

O estudo da estabilidade dinâmica dos estados de equilíbrio dos sistemas lineares-elásticos, com movimento plano, de dimensão finita, que incorporam potencial contacto com atrito, reveste-se de um interesse prático significativo. Em primeiro lugar, porque a instabilidade destes sistemas pode originar oscilações induzidas pelo atrito que, por sua vez, podem resultar em ruído e/ou desgaste considerável das superfícies de contacto. Por outro lado, estes sistemas constituem protótipos para o comportamento plástico-elástico encontrado em diferentes estruturas, nomeadamente em solos, rochas e betão.

O modelo representado na Figura 9.1 consiste numa barra horizontal, flexível e axialmente deformável, com massa desprezável. Uma das extremidades da barra está encastrada num bloco fixo, o que impede deslocamentos e rotações. A extremidade oposta está ligada a um perno rígido, que assume a posição vertical na configuração indeformada do sistema (representada na Figura 9.1) e que assenta num tapete rolante. É o deslocamento deste tapete que coloca o sistema em movimento. No topo do perno encontra-se uma massa M , com ângulo de rotação $r_M \geq 0$, à distância $h_M \geq 0$ do tapete rolante, conferindo inércia ao sistema.

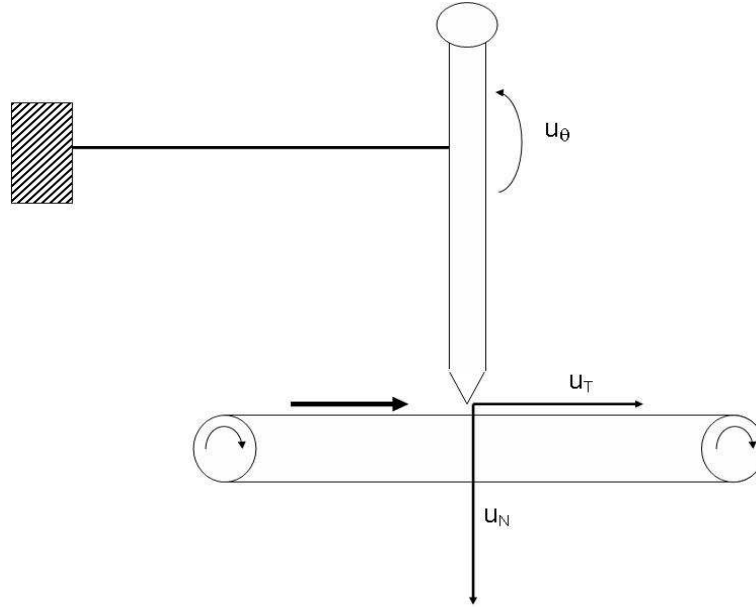


Figura 9.1: Configuração indeformada do sistema mecânico de potencial contacto com atrito.

Em cada instante, o sistema é caracterizado por um mínimo de três parâmetros independentes. Nesta análise, as coordenadas generalizadas escolhidas são:

- u_T : o deslocamento do ponto inferior do perno, tangente ao tapete rolante. Este deslocamento considera-se nulo na configuração indeformada do sistema e positivo à direita desta configuração.
- u_N : o deslocamento do ponto inferior do perno, normal ao tapete rolante. Este deslocamento considera-se positivo sob o tapete rolante e nulo na configuração indeformada do sistema. Uma vez que o tapete não é penetrável, este deslocamento nunca assume um valor positivo.
- u_θ : o ângulo de rotação do perno, nulo na configuração indeformada do sistema e positivo no sentido directo.

Uma descrição detalhada do sistema de equações diferenciais ordinárias que regem o movimento encontra-se em Martins, Barbarin, Raous e Pinto da Costa [73]. Considerando um escalonamento adequado, uma formulação possível é dada por

$$\epsilon^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & -h_M \\ 0 & 1 & 0 \\ -h_M & 0 & h_M^2 + r_M^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_T'' \\ u_N'' \\ u_\theta'' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 12\rho_k^2 & 6\rho_k r_k \\ -1 & 6\rho_k r_k & 1 + 4r_k^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_T \\ u_N \\ u_\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_T \\ r_N \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (9.1)$$

Neste sistema de equações diferenciais ordinárias, r_T e r_N representam as forças de reacção do tapete rolante sobre o ponto inferior do perno, nas direcções tangencial e normal, respectivamente. O parâmetro $\epsilon > 0$ é fixo e usado na conversão adimensional (com valor igual a 0.15 na implementação computacional considerada). A segunda matriz do sistema e as quantidades ρ_k e r_k estão relacionadas com a rigidez da barra.

O ponto inferior do perno está sujeito, potencialmente, a contacto (com atrito) com o tapete rolante. Assim, é necessário considerar alguns constrangimentos adicionais. O primeiro conjunto de restrições impõe as leis de contacto unilateral:

$$u_N \leq 0, \quad r_N \leq 0, \quad u_N r_N = 0. \quad (9.2)$$

O ponto inferior do perno deve ainda satisfazer a lei de atrito de Coulomb

$$r_T \in \mu r_N \sigma(u_T' - 1). \quad (9.3)$$

Neste caso $\mu \geq 0$ representa o coeficiente de atrito e $u_T' - 1$ a velocidade tangencial do ponto do perno relativamente ao tapete rolante. Na adimensionalização adoptada, a velocidade do tapete é unitária. A aplicação $\sigma(\cdot)$ é definida em $\mathbb{R}$ como,

$$\sigma(x) = \begin{cases} \frac{x}{|x|}, & \text{se } x \neq 0, \\ [-1, 1], & \text{se } x = 0. \end{cases}$$

É ainda necessário modelar um impacto, ou seja, modelar a situação em que o perno, em voo livre, choca com o tapete rolante. No instante de contacto, há que fazer uma interpretação impulsiva das equações governativas que regem o movimento (9.1), das leis de contacto unilateral (9.2) e de atrito (9.3).

O sistema é regido por cinco parâmetros (adimensionais) independentes, μ, h_M, r_M, r_k e ρ_k , que ainda devem satisfazer uma condição suficiente para a ocorrência de instabilidades de Flutter

$$g(\mu, h_M, r_M, r_k, \rho_k) < 0, \quad (9.4)$$

onde

$$g(\mu, h_M, r_M, r_k, \rho_k) = [1 + 4r_k^2 + r_M^2 + h_M^2 - h_M(2 - 6\mu r_k \rho_k)]^2 - 4r_M^2(4r_k^2 + 6\mu r_k \rho_k).$$

Do ponto de vista da aplicação, o objectivo é determinar um conjunto de parâmetros para os quais exista perca de contacto do ponto inferior do perno com o tapete rolante. O correspondente problema de optimização pode formular-se como:

$$\begin{aligned} \min \quad & |u_N| \\ \text{s.a.} \quad & \mu \geq 0, \quad h_M \geq 0, \\ & r_M \geq 0, \quad r_k > 0, \\ & \rho_k > 0, \\ & g(\mu, h_M, r_M, r_k, \rho_k) < 0. \end{aligned}$$

A região admissível do problema é definida por uma restrição não linear e cinco limites ao valor das variáveis. As derivadas das funções que definem estas restrições são, facilmente, calculáveis.

Cada cálculo de um valor para u_N implica a integração, no tempo, do sistema de equações diferenciais ordinárias (9.1). Neste processo de integração, as restrições ao sistema (9.2) e (9.3) são consideradas de forma implícita. Este procedimento introduz não diferenciabilidades na função objectivo, o que torna interessante o recurso a métodos de OSD.

9.1.2 Resultados computacionais

Na resolução deste problema considerámos um método de procura directa direccional, em conjunto com as estratégias baseadas em derivadas simplécticas sugeridas no Capítulo 5, de forma a melhorar a respectiva eficiência. Na identificação dos conjuntos em equilíbrio- Λ e no cálculo das derivadas simplécticas consideraram-se parâmetros de valor igual aos descritos na Subsecção 5.6.

Uma vez que as derivadas das restrições estão disponíveis, a classificação duma restrição como ϵ -activa é feita de acordo com o descrito no Capítulo 8. Neste caso $\epsilon_k = \min(\epsilon_{min}, 10\alpha_k)$, com $\epsilon_{min} = 10^{-1}$. Quando $T(x_k; \epsilon_k) = \mathbb{R}^n$ consideraram-se as duas bases positivas, $[I \ -I]$ e $[-e \ I]$. Nos restantes casos, o conjunto de geradores positivos para $T(x_k; \epsilon_k)$ é calculado de acordo com o algoritmo descrito em Lewis e Torczon [65].

A implementação computacional foi testada num processador dual Intel Xeon (2.2 GHz e 1G de RAM). Cada avaliação da função objectivo demora, em média, cerca de 1.2 segundos de tempo de CPU. Embora apenas se testem pontos pertencentes à região admissível do problema, nem sempre a simulação é bem sucedida, ou seja, nem sempre é possível gerar um

estratégia	tempo(seg)	%equilíbrio	favals	finft	fvalor
ordem-ds,sgradiente (guarda-todos)	2.50e+03	53%	130	28	1.00e-05
ordem-ds,passo-HKT,sgradiente (guarda-todos)	2.51e+03	53%	130	28	1.00e-05
ordem-ds,procura-ds,sgradiente (guarda-todos)	2.60e+03	53%	133	29	1.00e-05
ordem-ds,procura-ds,passo-HKT,sgradiente (guarda-todos)	2.60e+03	53%	133	29	1.00e-05
ordem-dinâmica	1.69e+02	—	154	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,passo-ds,shessiana (guarda-todos)	1.72e+02	23%	154	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,procura-ds,sgradiente (guarda-sucesso)	1.74e+02	29%	155	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,procura-ds,shessiana (guarda-sucesso)	1.73e+02	13%	155	0	1.02e-05
ordem-ds,shessiana (guarda-todos)	2.27e+02	21%	157	0	1.01e-05
ordem-ds,passo-ds,shessiana (guarda-todos)	2.28e+02	21%	157	0	1.01e-05
ordem-ds,passo-HKT,shessiana	2.28e+02	21%	157	0	1.01e-05
ordem-dinâmica,passo-HKT	1.94e+02	—	159	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-HKT, sgradiente (guarda-sucesso)	1.99e+02	29%	159	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,procura-ds,shessiana (guarda-todos)	1.76e+02	23%	160	0	1.02e-05
ordem-dinâmica,procura-ds,passo-ds, shessiana (guarda-todos)	1.74e+02	23%	160	0	1.02e-05
base	2.27e+02	—	161	0	1.01e-05

Tabela 9.1: Resultados computacionais para as melhores estratégias na simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $D = [I \ -I]$.

valor para u_N . Esta situação é contornada seguindo uma abordagem de função de barreira, descrita no Capítulo 8. Quando o simulador falha, não calculando um valor para a função objectivo, é atribuído a esta função o valor infinito (como se tratasse de uma função de barreira do tipo (8.2)). Em média, a atribuição de um infinito demora cerca de 80 segundos de tempo de CPU, aumentando em 67% o tempo computacional médio correspondente a uma avaliação bem sucedida.

Os limites aos valores das variáveis $r_k > 0$ e $\rho_k > 0$ foram relaxados para $r_k \geq 0$ e $\rho_k \geq 0$, respectivamente. A restrição não linear foi igualmente relaxada para $g(\mu, h_M, r_M, r_k, \rho_k) \leq 0$. A aproximação inicial fornecida ao optimizador foi

$$[\mu, h_M, r_M, r_k, \rho_k]^\top = [2.2, 0.5, 1.5, 0.7, 0.07]^\top,$$

correspondendo a $|u_N| = 0.194605876$. Como critério de paragem considerou-se um valor do comprimento do passo inferior a 10^{-5} .

Nas Tabelas 9.1 e 9.2 encontram-se os resultados para as versões que apresentaram um desempenho computacional superior ao da versão **base** do algoritmo de procura directa direccional. A Tabela 9.1 corresponde ao caso em que, na ausência de restrições ϵ -activas, se utiliza a base positiva $D = [I \ -I]$. No caso da Tabela 9.2, a base positiva considerada

estratégia	tempo(seg)	%equilíbrio	favals	finft	fvalor
ordem-ds,shessian (guarda-todos)	1.36e+02	14%	114	0	1.00e-05
ordem-ds,passo-ds,shessian (guarda-todos)	1.36e+02	14%	114	0	1.00e-05
base	1.39e+02	—	117	0	1.00e-05

Tabela 9.2: Resultados computacionais para as melhores estratégias na simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $D = [-e \ I]$.

na ausência de restrições ϵ -activas é $D = [-e \ I]$.

Relativamente ao valor da função na iterada final do algoritmo, os resultados não apresentam diferenças significativas. Em qualquer das tabelas, a ordenação das direcções de sondagem, de acordo com um indicador de descida simpléctico, figura entre as estratégias que apresentam melhor desempenho, quando se considera o total de cálculos exigidos para a função. Contudo, nos resultados reportados na Tabela 9.1 nota-se um aumento do número de falhas do código ao avaliar a função, quando se utiliza uma estratégia de ordenação baseada na direcção simétrica do gradiente simpléctico, calculado numa variante **guarda-todos**.

De acordo com o que foi descrito no Capítulo 8, a convergência dos métodos de procura directa direcciona encontra-se bem estabelecida quando a região admissível é definida por restrições lineares (ver Lewis e Torczon [65]). Na presença de restrições mais gerais, embora com derivadas conhecidas, são necessárias algumas modificações algorítmicas (que passam pela projecção de pontos na região admissível) e algumas hipóteses adicionais acerca da regularidade das restrições, para garantir a convergência global dos algoritmos (ver Lucidi, Sciandrone e Tseng [70]). Na impossibilidade de garantir que estas hipóteses adicionais são satisfeitas pelas restrições do problema em análise, optámos por linearizar as restrições para os melhores pontos encontrados com a versão não linear e as duas diferentes bases positivas. Posteriormente, aplicámos a procura directa direcciona e as estratégias baseadas em derivadas simpléticas na resolução dos problemas correspondentes (agora com restrições lineares). Com esta abordagem, estamos a resolver problemas diferentes do original e não temos a garantia que as iteradas geradas pelo algoritmo de procura directa direcciona satisfaçam a restrição não linear (9.4). Os resultados obtidos são sumariados nos dois parágrafos seguintes.

Para a base positiva $[I \ -I]$, a estratégia correspondente ao melhor resultado consiste na ordenação das direcções de sondagem de acordo com a direcção simétrica do gradiente simpléctico, calculado numa variante **guarda-todos**. A utilização desta estratégia traduziu-se num valor final da função objectivo igual a $1.00703796\text{e-}05$, exigindo um total de 175 cálculos, dos quais 7 são infinitos. À versão **base** do método de procura directa direcciona corresponde o valor da função $1.00029056\text{e-}05$, com um total de 575 cálculos e 174 infinitos.

Quando, na ausência de restrições ϵ -activas, se considera como conjunto gerador positivo a base $[-e \ I]$, então a estratégia que apresenta o melhor desempenho continua a ser a do parágrafo anterior, embora as derivadas simplécticas sejam calculadas numa variante **guarda-sucesso**. O valor da função na iterada final é de $1.47019677\text{e-}05$, com um total de 132 cálculos e 35 infinitos. Neste caso, a versão **base** corresponde a 138 cálculos para o valor da função, com 16 infinitos, mas apenas permite obter um valor final para a função igual a $1.11235872\text{e-}03$. As Figuras 9.2 e 9.3 representam a evolução do valor da função objectivo em função do total de cálculos efectuados durante o processo de minimização, para a versão **base** e para a estratégia baseada em derivadas simplécticas com o melhor desempenho.

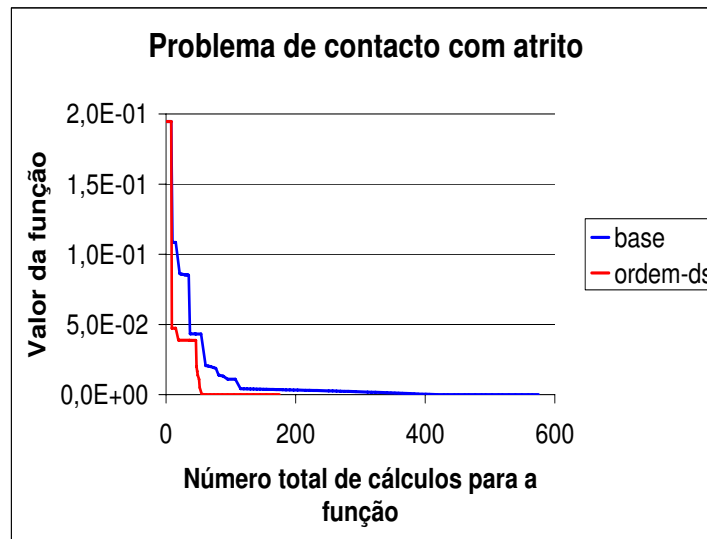


Figura 9.2: Aplicação de um método de procura directa direcciona à simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $[I \ -I]$. O indicador de descida simpléctico é calculado numa variante **sgradiente**, **guarda-todos**.

É difícil generalizar conclusões a partir de um único problema. Contudo, confirma-se o valor das estratégias baseadas em derivadas simplécticas como forma de melhorar a eficiência da procura directa direcciona.

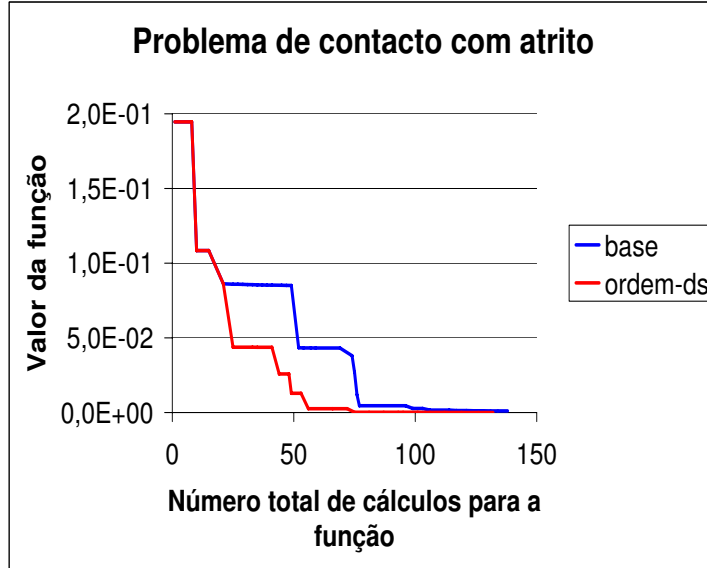


Figura 9.3: Aplicação de um método de procura directa direccional à simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito. Na ausência de restrições ϵ -activas, considera-se como conjunto de sondagem a base positiva $[-e I]$. O indicador de descida simpléctico é calculado numa variante `sgradiente`, guarda-sucesso.

9.2 Calibração de parâmetros estelares

9.2.1 Descrição do problema

O conhecimento de alguns parâmetros estelares, em particular os valores da massa e da idade, permite a caracterização da estrutura interna e da evolução de uma estrela. A determinação destes parâmetros tem um impacto abrangente em Astrofísica, nomeadamente ao nível das teorias que descrevem a formação dos sistemas planetários e de estrelas e das teorias que descrevem a evolução química das galáxias.

Para a generalidade das estrelas, exceptuando-se o caso do Sol, o valor destes parâmetros não está disponível por observação directa. Contudo, arbitrando o seu valor, a resolução das equações que caracterizam a estrutura interna da estrela permite calcular algumas grandezas para as quais se dispõem de valores observados, o que permite ajustar os valores arbitrados e medir a sua qualidade.

A definição de um modelo teórico que descreva a evolução de uma estrela exige o conhecimento da massa estelar M , da idade t da estrela e das abundâncias iniciais de hidrogénio X ,

de hélio Y e de outros elementos Z . A massa estelar, M , é definida proporcionalmente à massa do Sol (de valor igual a 1.989×10^{33} gramas). A idade da estrela, t , é expressa em Gyr (1 Gyr equivale a 1000 milhões de anos). Os valores de X , Y e Z são calculados em percentagem da composição total da estrela, pelo que é válida a relação $Z = 1 - X - Y$.

Os valores arbitrados para os parâmetros que caracterizam uma estrela (M , t , X e Y) têm implicações na simulação da evolução da própria estrela, afectando alguns mecanismos ainda não completamente compreendidos. Como exemplo, podemos mencionar o transporte de energia por convecção (no interior da estrela), actualmente descrito pela Teoria de Comprimento de Mistura. A modelação da convecção estelar, recorrendo à referida teoria, exige considerar dois parâmetros adicionais: o parâmetro de convecção (a) e o coeficiente de *overshooting* (ov) (que representa a extensão do núcleo convectivo de uma estrela).

Um modelo teórico que define a evolução de uma estrela pode ser caracterizado por seis parâmetros não observáveis (M , t , X , Y , a e ov). Quando se atribui valores a estes seis parâmetros do modelo, pode resolver-se as equações diferenciais que caracterizam a estrutura interna e a evolução da estrela. Estas equações modelam a conservação de massa, a conservação de energia, o equilíbrio hidrostático, a produção e destruição de elementos químicos por reacções termonucleares e o transporte de energia. Neste último caso, a equação considerada é uma instância particular de uma equação de difusão. Da resolução destas equações resultam algumas grandezas comparáveis às observáveis para a estrela, nomeadamente a temperatura efectiva (T_{eff}), a luminosidade total (L) e o raio da estrela (R), o qual é utilizado para determinar a gravidade estelar (g).

Os valores de T_{eff} , g e de Z/X podem ser directamente observáveis através de análises de espectroscopia. As características específicas de algumas estrelas permitem, ainda, determinar o valor de L . Desta forma, a calibração dos seis parâmetros estelares corresponde ao problema de optimização

$$\min f(M, t, X, Y, a, ov),$$

em que

$$f(M, t, X, Y, a, ov) = \left(\frac{T_{eff} - T_{eff,obs}}{\delta T_{eff,obs}} \right)^2 + \left(\frac{L - L_{obs}}{\delta L_{obs}} \right)^2 + \left(\frac{\frac{Z}{X} - (\frac{Z}{X})_{obs}}{\delta (\frac{Z}{X})_{obs}} \right)^2 + \left(\frac{g - g_{obs}}{\delta g_{obs}} \right)^2.$$

Nesta expressão, o índice *obs* representa grandezas observáveis e os erros absolutos nas observações são precedidos da letra δ .

A resolução deste problema não é trivial, dada a sua não linearidade e não convexidade e devido ao número dos parâmetros a determinar ser superior ao número de grandezas observáveis (seis e quatro, respectivamente). Actualmente, a idade estelar e a massa são

M	t	X	Y	a	ov
0.7	100	—	0.23	0.5	0
1.4	10000	0.761	0.4	2.5	0.5

Tabela 9.3: Limites a considerar nos valores das variáveis do problema da calibração de parâmetros estelares.

estimadas usando interpolação em grelhas de modelos estelares, considerando algumas aproximações *ad-hoc* para as restantes variáveis.

Na Tabela 9.3 estão representados os limites no valor das variáveis. Existe ainda uma restrição adicional, que modela o valor mínimo de outros elementos presentes na estrela, que não o hélio e o hidrogénio, com a forma

$$X + Y \leq 0.991.$$

Todas as restrições são lineares, pelo que é garantida a convergência global para um ponto estacionário, quando aplicamos um método de procura directa direcciona à resolução deste problema.

Fixando os valores das variáveis M , t , X , Y , a e ov , o código de evolução estelar CESAM, Versão 3 (ver Morel [78]) determina os valores de T_{eff} , L e R correspondentes. O valor de g é calculado a partir de R considerando

$$g = \frac{cM}{R^2}.$$

A constante c resulta do produto entre o valor da constante de gravidade universal e algumas constantes utilizadas para conversão de unidades das várias grandezas envolvidas nos cálculos.

9.2.2 Resultados computacionais preliminares

Numa primeira fase, foi utilizado um algoritmo de procura directa direcciona (incorporando estratégias baseadas em derivadas simplécticas) na estimação de parâmetros conhecidos para algumas estrelas, nomeadamente o Sol e as estrelas HD37124 e HD46375. Pretendia-se verificar em que condições é que o algoritmo de optimização escolhido era capaz de reproduzir (e eventualmente refinar) os parâmetros conhecidos para estas estrelas. Conforme já foi referido, é prática corrente em Astrofísica calcular o valor destes parâmetros por interpolação em grelhas de pontos, que vão sendo sucessivamente refinadas, o que se traduz num número excessivo de cálculos para a função objectivo. Num futuro próximo, pretende-se a calibração de parâmetros para estrelas acerca das quais não existe muita informação disponível sobre

os valores óptimos.

A implementação computacional foi testada num processador Intel Xeon (2.0 GHz e 1G de RAM). Cada cálculo de um valor para a função a minimizar, recorrendo ao código CESAM, demora cerca de 55, 73 e 39 segundos de tempo de CPU para o Sol, a estrela HD46375 e a estrela HD37124, respectivamente. À semelhança do que sucede com a simulação do sistema mecânico de potencial contacto com atrito, existem conjuntos de parâmetros, admissíveis face às restrições consideradas para o problema, em que falha o cálculo do valor da função. Como exemplo, se as abundâncias iniciais de hélio (Y) e de hidrogénio (X) não forem suficientes para simular a vida da estrela até à idade (t) considerada, o valor gerado pelo código CESAM não corresponde ao valor indicado para t , mas sim ao t correspondente à idade em que se esgota um dos elementos químicos. Nestas situações, é seguida uma abordagem de função de barreira, descrita no Capítulo 8, atribuindo-se o valor infinito à função.

Dado o tempo computacional envolvido em cada simulação relativa a um conjunto de parâmetros, restringimos os testes computacionais às versões **base** e **ordem-ds**, utilizando como indicador de descida simpléctico a direcção simétrica de um gradiente simpléctico, calculado numa variante **guarda-todos** (ver o Capítulo 5). Esta última versão corresponde à estratégia baseada em derivadas simplécticas que permitiu a maior redução no número total de cálculos necessários para a função objectivo (ver a Secção 5.6). Como critério de paragem considerámos um valor do comprimento do passo inferior a 10^{-4} .

Na identificação dos conjuntos em equilíbrio- Λ , a utilizar no cálculo das derivadas simplécticas, consideraram-se parâmetros Λ e σ_k de valor igual aos descritos na Subsecção 5.6. O número mínimo de pontos permitido para a construção de um gradiente simpléctico foi $(n + 1)/2$. Testaram-se ainda duas variantes, relativas ao número máximo de pontos considerado na construção dos gradientes simplécticos, $n + 1$ e $2n + 1$, respectivamente. Os resultados foram idênticos em qualquer uma das variantes escolhidas.

A classificação de uma restrição como ϵ -activa e o cálculo do respectivo conjunto gerador positivo a utilizar no passo de sondagem é feita de forma análoga à do problema de simulação do sistema mecânico (ver a Subsecção 9.1.2). Exceptua-se o valor de ϵ_{min} que, neste caso, se considerou igual a 10^{-2} . Na ausência de restrições ϵ -activas, o conjunto de sondagem consistiu na base positiva $[I - I]$.

O conjunto de parâmetros uniformemente aceites para o Sol pela comunidade Astrofísica é $[M, t, X, Y, a, ov]^\top = [1, 4600, 0.70612, 0.2765, 1.65, 0]^\top$, correspondente ao valor da função $2.84006802e-01$. A aproximação inicial que foi fornecida ao algoritmo de procura directa direccional foi $[M, t, X, Y, a, ov]^\top = [1, 4600, 0.707174, 0.2755, 1.69, 0]^\top$, à qual está associado o valor $1.46714528e+01$ para a função.

No caso das estrelas HD37124 e HD46375, as aproximações iniciais foram extraídas de Fernandes e Santos [41]. Neste artigo, fixando uma idade para cada uma das estrelas, cujos

valores foram determinados por Donahue [39] recorrendo a uma calibração de actividade cromosférica, e considerando ov igual a zero, foram estimados os valores das restantes quatro variáveis, recorrendo a cinco modelos de evolução estelar distintos. Para cada uma das duas estrelas, calculámos o valor da função objectivo em cada um dos cinco pontos determinados. A aproximação inicial fornecida ao método de procura directa direcciona corresponde ao ponto de valor mínimo, para cada uma das estrelas. Assim, considerou-se como aproximação inicial os pontos $[M, t, X, Y, a, ov]^T = [0.90, 3.9, 0.721, 0.27, 0.9, 0.00]^T$ e $[M, t, X, Y, a, ov]^T = [1.03, 4.5, 0.696, 0.27, 1.55, 0.00]^T$, para as estrelas HD37124 e HD46375, respectivamente. Os correspondentes valores da função objectivo são $3.03271524e+01$ e $1.85986383e+00$.

Os resultados obtidos para as três estrelas, com as duas versões da procura directa direcciona, encontram-se descritos na Tabela 9.4

Da análise desta tabela, conclui-se que, desde que seja fornecida uma aproximação inicial de qualidade razoável, um método de procura directa direcciona melhora a aproximação fornecida, permitindo um ajuste final de boa qualidade. Para o Sol e a estrela HD46375, não há benefícios significativos com a introdução de estratégias de ordenação baseadas em gradientes simplécticos. No entanto, para a estrela HD37124, a ordenação das direcções de sondagem permitiu uma redução de 8% no total de cálculos necessários, o que se traduz numa redução de 47 minutos de tempo de CPU. A Figura 9.4 representa a evolução do valor da função, de acordo com o total de cálculos efectuados, durante o processo de minimização da estrela HD37124.

No caso do Sol, avaliámos ainda o que sucedia se a aproximação inicial fornecida ao método de procura directa direcciona fosse de má qualidade. Considerámos, como aproximação inicial, o vector $[M, t, X, Y, a, ov]^T = [0.8, 2, 0.7, 0.29, 1, 0.2]^T$, correspondente ao valor $1.03134593e+05$ para a função. Neste caso, mesmo utilizando uma estratégia de ordenação das direcções de sondagem, os resultados foram de má qualidade. A iterada final calculada pelo algoritmo corresponde ao valor $1.73476314e+02$, exigindo um total de 10271 cálculos para a função.

Este problema de minimização pretende determinar o valor de seis parâmetros, a partir do ajuste de quatro grandezas observáveis. Parece-nos plausível a existência de vários minimizantes locais, o que justificaria o mau ajuste obtido quando a aproximação inicial fornecida ao optimizador está longe do minimizante global. No futuro, pretendemos continuar a trabalhar neste problema, nomeadamente utilizando como aproximações iniciais, a fornecer ao método de procura directa direcciona, as iteradas finais geradas pelo código de optimização global PSwarm (ver Vaz e Vicente [91]).

estrela	tempo(seg)	%equi	favals	finft	fvalor	M	t	X	Y	a	ov
base											
Sol	10620	—	194	3	1.09184748e-01	1.00345267e+00	4.58046875e+03	7.08638844e-01	2.74035156e-01	1.65252441e+00	1.18164062e-01
HD37124	25440	—	650	1	5.49551854e+00	9.83563030e-01	2.29600328e+03	7.46390625e-01	2.44609375e-01	9.32714844e-01	5.98144531e-03
HD46375	18200	—	249	4	1.39574948e-03	1.03000000e+00	6.60241699e+03	6.96000000e-01	2.70000000e-01	1.42475586e+00	3.14697266e-01
ordem-ds											
Sol	10660	29%	195	3	1.63831070e-01	1.00414320e+00	4.58046875e+03	7.09127125e-01	2.73546875e-01	1.65362305e+00	1.17797852e-01
HD37124	23760	45%	600	1	5.38259757e+00	9.78362029e-01	2.29640779e+03	7.43521973e-01	2.47478027e-01	9.36132813e-01	1.66015625e-02
HD46375	18100	14%	247	4	1.39574948e-03	1.03000000e+00	6.60241699e+03	6.96000000e-01	2.70000000e-01	1.42475586e+00	3.14697266e-01

Tabela 9.4: Resultados computacionais para a calibração de parâmetros estelares.

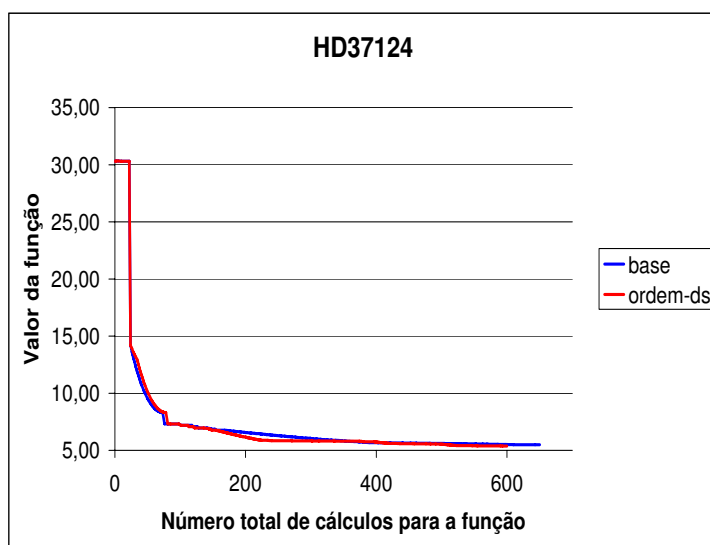


Figura 9.4: Calibração de parâmetros para a estrela HD37124.

Capítulo 10

Conclusões e questões em aberto

10.1 Conclusões

A principal contribuição do trabalho de investigação, que conduziu à escrita desta dissertação, consistiu na utilização das derivadas simplécticas como forma de melhorar a eficiência dos métodos de procura directa direcciona. As derivadas simplécticas, em particular os gradientes simplécticos, já eram utilizadas como direcções de procura em métodos de procura unidirecciona para problemas de OSD (ver o Capítulo 4). A sua utilização na construção de indicadores de descida, como forma de melhorar a eficiência dos métodos de procura directa direcciona, constituiu uma contribuição original que se revelou compensadora.

A qualidade dos gradientes simplécticos, calculados a partir de conjuntos com boa geometria, enquanto aproximações dos verdadeiros gradientes, já fora analisada para funções continuamente diferenciáveis (ver o Teorema 4.1.1). No Capítulo 6 generalizámos esta análise a gradientes simplécticos de funções não suaves, calculados em pontos pertencentes a subsucessões refinadas convergentes geradas por um método de procura directa direcciona. Em particular, mostrámos a existência de um ponto limite para a subsucessão de gradientes simplécticos (ver o Lema 6.1.1), o qual pode ser utilizado na construção de limites inferiores para as derivadas direccionais generalizadas da função, calculadas ao longo das direcções de sondagem (ver a Subsecção 6.1.1). No caso em que a função objectivo é estritamente diferenciável no ponto limite de uma subsucessão refinada convergente, x_* , provámos que um dos pontos limite da subsucessão de gradientes simplécticos coincide com o verdadeiro gradiente da função calculado em x_* (ver o Teorema 6.1.3).

O Teorema 5.4.1 e a Proposição 5.4.1 garantiram-nos a possibilidade de identificação de conjuntos com boa geometria (que satisfazem uma condição de equilíbrio- Λ), a partir de conjuntos de pontos previamente avaliados no decurso da aplicação de um método de procura directa direcciona. Desta forma, estes conjuntos de pontos podem ser utilizados na construção de derivadas simplécticas. Estabelecida a sua qualidade enquanto aproximações

das verdadeiras derivadas, mesmo para funções não suaves, justifica-se o uso de derivadas simplécticas na construção de indicadores de descida com o intuito de melhorar a eficiência de um método de procura directa direccional (ver a Secção 5.1).

Sugeriram-se três estratégias distintas para melhorar a referida eficiência: a ordenação das direcções de sondagem de acordo com o ângulo que formam com o indicador de descida, a actualização do comprimento do passo baseada na exigência de um decréscimo suficiente no valor da função e a definição de um passo de procura (ainda que grosseiro) baseado na direcção do indicador de descida simpléctico (ver as Secções 5.2 e 5.3). Na Secção 6.2 propôs-se, ainda, um critério de paragem baseado no sinal de estimativas das derivadas direccionais generalizadas, calculadas nas direcções de sondagem do algoritmo, utilizando os gradientes simplécticos. Porém, a nossa experiência numérica mostrou que a utilização de um critério de paragem deste tipo é semelhante à utilização de um critério de paragem baseado somente no comprimento do passo.

Qualquer uma das estratégias propostas não implica, *a priori*, um acréscimo no número de cálculos necessários para a função objectivo. A sua eficiência foi avaliada computacionalmente, quer para funções continuamente diferenciáveis (ver a Secção 5.6), quer para funções não suaves (ver a Secção 6.4). Da experiência computacional realizada, conclui-se que a introdução de estratégias baseadas em derivadas simplécticas em métodos de procura directa direccional permite reduzir, de forma significativa, o número total de cálculos da função objectivo (e, em alguns casos, melhorar a qualidade da iterada final calculada pelo algoritmo).

Como indicadores de descida simplécticos, as direcções simétricas dos gradientes simplécticos evidenciaram uma qualidade superior às direcções de Newton simplécticas. A estratégia de ordenação das direcções de sondagem, baseada na direcção simétrica do gradiente simpléctico, apresentou ganhos significativos relativamente ao número total de cálculos exigidos para a função (aproximadamente 50% para funções continuamente diferenciáveis e 27% no caso de funções não suaves).

As estratégias baseadas em derivadas simplécticas foram ainda testadas em duas aplicações reais, uma resultante da simulação de um sistema mecânico de potencial contacto com atrito e outra proveniente da calibração de parâmetros estelares (ver o Capítulo 9). Em qualquer dos casos, obtiveram-se benefícios com a introdução destas estratégias.

Os resultados teóricos acerca da qualidade dos gradientes simplécticos, bem como as reduções significativas obtidas para o número total de avaliações da função objectivo, resultantes da incorporação de estratégias baseadas em derivadas simplécticas em métodos de procura directa direccional, motivaram o desenvolvimento de dois novos algoritmos para OSD. No Capítulo 7 foram propostos um método de procura directa direccional curvilínea e um método híbrido de procura directa e unidireccional. Para o primeiro algoritmo, mostrou-se a

convergência global da sucessão de iteradas gerada pelo algoritmo para um ponto estacionário de primeira ordem, no contexto da minimização de funções continuamente diferenciáveis. No caso do algoritmo híbrido, o correspondente resultado de convergência global exigiu a continuidade da Hessiana da função e foi apenas obtido para uma subsucessão da sucessão de iteradas gerada pelo algoritmo.

10.2 Questões em aberto

O desenvolvimento de novos algoritmos de optimização deve, em geral, ser acompanhado de uma análise das propriedades de convergência que os validam. Porém, esta análise não é suficiente para os tornar atraentes. É também necessário mostrar a sua competitividade computacional face a algoritmos já existentes. Alguns testes preliminares revelaram resultados promissores para os dois novos algoritmos propostos no Capítulo 7. Contudo, é necessário um estudo numérico mais completo para comprovar esta competitividade.

O trabalho relativo à aplicação descrita na Secção 9.2 não está, igualmente, terminado. Quando foi fornecida uma boa aproximação inicial ao algoritmo de procura directa direccional, este efectuou uma calibração adequada dos parâmetros já conhecidos para algumas estrelas. Neste caso, a introdução de uma estratégia de ordenação baseada em gradientes simplécticos foi acompanhada de alguns benefícios. Pretende-se passar à calibração de parâmetros de estrelas para as quais não se dispõe de informação acerca dos valores óptimos. Numa primeira fase, pretendemos utilizar como aproximações iniciais as resultantes da aplicação do código de optimização global **PSwarm**, cujo algoritmo também não recorre a derivadas (ver Vaz e Vicente [91]).

Tal como foi dito no Capítulo 2, o que pode viabilizar o uso de métodos de procura directa direccional em problemas com um número considerável de variáveis é o facto destes algoritmos serem facilmente paralelizáveis. Nesta dissertação propuseram-se diferentes estratégias que permitiram aumentar a eficiência dos métodos de procura directa direccional, mas num contexto sequencial. As ideias propostas são generalizáveis à procura directa direccional em paralelo, constituindo uma extensão natural deste trabalho.

Uma questão que deixamos em aberto prende-se com a identificação de conjuntos com boa geometria na presença de restrições. Conforme foi visto no Capítulo 6, mesmo quando se trata da minimização de funções não suaves, os gradientes simplécticos, quando construídos a partir de conjuntos com boa geometria, constituem boas aproximações aos verdadeiros gradientes. O Teorema 5.4.1 e a Proposição 5.4.1 garantem a identificação de conjuntos com boa geometria na ausência de restrições. Quando estas estão presentes, dependendo de quais as restrições que se encontram aproximadamente activas, o número de pontos de sondagem pode não ser suficiente para calcular uma derivada simpléctica com a qualidade necessária, ou

porque não existe um número suficiente de geradores positivos do cone tangente, ou porque, mesmo sendo este número suficiente, alguns pontos de sondagem não são admissíveis.

Como exemplo, refira-se o caso do método de procura directa com grelha adaptável de Audet e Dennis [11]. Este algoritmo não explora a estrutura das restrições na construção dos conjuntos geradores a utilizar no passo de sondagem. Em cada iteração é considerado um conjunto gerador positivo para $\mathbb{R}^n$, garantindo-se que a união destes conjuntos é assintoticamente densa em $\mathbb{R}^n$ (e, por maioria de razão, assintoticamente densa no cone tangente de interesse). Neste caso, o número de geradores considerado em cada iteração permite a construção de gradientes simplécticos com qualidade, desde que seja possível garantir a admissibilidade dos pontos correspondentes.

Em geral, de acordo com o que foi descrito no Capítulo 8, na presença de restrições lineares, ou mesmo de restrições não lineares com derivadas conhecidas, os algoritmos exploram a estrutura das derivadas das restrições ϵ -activas na construção de conjuntos geradores positivos a testar no passo de sondagem. Neste caso, além do problema da admissibilidade, levanta-se ainda a questão do número de geradores ser ou não ser, por si só, suficiente para a construção das derivadas simplécticas.

É nosso objectivo analisar a minimização de funções sujeitas a restrições recorrendo a métodos de procura directa direccionada, propondo formas de identificação de conjuntos com boa geometria que validem estratégias baseadas em derivadas simplécticas, com o intuito de melhorar a eficiência destes algoritmos.

Bibliografia

- [1] M. A. ABRAMSON, *Mixed variable optimization of a load-bearing thermal insulation system using a filter pattern search algorithm*, Optim. Eng., 5 (2004), pp. 157–177.
- [2] —, *Second-order behavior of pattern search*, SIAM J. Optim., 16 (2005), pp. 515–530.
- [3] M. A. ABRAMSON E C. AUDET, *Convergence of mesh adaptive direct search to second-order stationary points*, SIAM J. Optim., 17 (2006), pp. 606–619.
- [4] M. A. ABRAMSON, C. AUDET E J. E. DENNIS JR., *Generalized pattern searches with derivative information*, Math. Program., 100 (2004), pp. 3–25.
- [5] M. A. ABRAMSON, O. A. BREZHNEVA, J. E. DENNIS JR. E R. L. PINGEL, *Pattern search in the presence of degeneracy*, Optim. Methods Softw., a aparecer.
- [6] P. ALBERTO, F. NOGUEIRA, H. ROCHA E L. N. VICENTE, *Pattern search methods for user-provided points: Application to molecular geometry problems*, SIAM J. Optim., 14 (2004), pp. 1216–1236.
- [7] C. AUDET, *Comunicação privada*, 2006.
- [8] C. AUDET, A. L. CUSTÓDIO E J. E. DENNIS JR., *Erratum: Mesh adaptive direct search algorithms for constrained optimization*, SIAM J. Optim., a aparecer.
- [9] C. AUDET E J. E. DENNIS JR., *Analysis of generalized pattern searches*, SIAM J. Optim., 13 (2002), pp. 889–903.
- [10] —, *A pattern search filter method for nonlinear programming without derivatives*, SIAM J. Optim., 14 (2004), pp. 980–1010.
- [11] —, *Mesh adaptive direct search algorithms for constrained optimization*, SIAM J. Optim., 17 (2006), pp. 188–217.

- [12] C. AUDET E J. E. DENNIS JR., *A MADS algorithm with a progressive barrier for derivative-free optimization*, Relatório Técnico G-2007-37, Les Cahiers du GERAD, Département de Mathématiques et de Génie Industriel, École Polytechnique de Montréal, Canadá, 2007.
- [13] M. C. BERENBAUM, *Direct search methods in the optimisation of cancer chemotherapy regimens*, British J. Cancer, 61 (1990), pp. 101–109.
- [14] A. J. BOOKER, J. E. DENNIS, JR., P. D. FRANK, D. B. SERAFINI, V. TORCZON E M. W. TROSSET, *A rigorous framework for optimization of expensive functions by surrogates*, Struct. Multidiscip. Optim., 17 (1999), pp. 1–13.
- [15] D. M. BORTZ E C. T. KELLEY, *The simplex gradient and noisy optimization problems*, em Computational Methods in Optimal Design and Control, Progress in Systems and Control Theory, J. T. Borggaard, J. Burns, E. Cliff e S. Schreck, eds., vol. 24, Birkhäuser, Boston, 1998, pp. 77–90.
- [16] G. E. P. BOX, *Evolutionary operation: A method for increasing industrial productivity*, Appl. Stat., 6 (1957), pp. 81–101.
- [17] T. D. CHOI E C. T. KELLEY, *Superlinear convergence and implicit filtering*, SIAM J. Optim., 10 (2000), pp. 1149–1162.
- [18] F. H. CLARKE, *Optimization and Nonsmooth Analysis*, John Wiley & Sons, Nova Iorque, 1983. Reeditado por SIAM, Filadélfia, 1990.
- [19] B. COLSON E PH. L. TOINT, *Optimizing partially separable functions without derivatives*, Optim. Methods Softw., 20 (2005), pp. 493–508.
- [20] A. R. CONN, N. I. M. GOULD E PH. L. TOINT, *Trust-Region Methods*, MPS-SIAM Series on Optimization, Filadélfia, 2000.
- [21] A. R. CONN E PH. L. TOINT, *An algorithm using quadratic interpolation for unconstrained derivative free optimization*, em Nonlinear Optimization and Applications, G. D. Pillo e F. Giannessi, eds., Plenum Publishing, Nova Iorque, 1996, pp. 27–47.
- [22] A. R. CONN, K. SCHEINBERG E PH. L. TOINT, *On the convergence of derivative-free methods for unconstrained optimization*, em Approximation Theory and Optimization: Tributes to M. J. D. Powell, M. D. Buhmann e A. Iserles, eds., Cambridge University Press, Cambridge, 1997, pp. 83–108.

- [23] A. R. CONN, K. SCHEINBERG E L. N. VICENTE, *Geometry of sample sets in derivative free optimization: Polynomial regression and underdetermined interpolation*, IMA J. Numer. Anal., a aparecer.
- [24] ———, *Introduction to Derivative-Free Optimization*, MPS-SIAM Series on Optimization, Filadélfia. A aparecer.
- [25] ———, *Global convergence of general derivative-free trust-region algorithms to first and second order critical points*, Relatório Técnico 06–49, Departamento de Matemática, Universidade de Coimbra, Portugal, 2006.
- [26] ———, *Geometry of interpolation sets in derivative free optimization*, Math. Program., 111 (2008), pp. 141–172.
- [27] I. D. COOPE E C. J. PRICE, *On the convergence of grid-based methods for unconstrained optimization*, SIAM J. Optim., 11 (2001), pp. 859–869.
- [28] A. L. CUSTÓDIO, J. E. DENNIS JR. E L. N. VICENTE, *Using simplex gradients of nonsmooth functions in direct search methods*, IMA J. Numer. Anal., a aparecer.
- [29] A. L. CUSTÓDIO E L. N. VICENTE, *Curvilinear and hybrid line-direct search methods for derivative free optimization*, em preparação.
- [30] ———, *Using sampling and simplex derivatives in pattern search methods (complete numerical results)*, ver <http://www.mat.uc.pt/~lnv/papers/sid-psm-complete.pdf>, 2006.
- [31] ———, *Using sampling and simplex derivatives in pattern search methods*, SIAM J. Optim., 18 (2007), pp. 537–555.
- [32] C. DAVIS, *Theory of positive linear dependence*, Amer. J. Math., 76 (1954), pp. 733–746.
- [33] R. DE LEONE, M. GAUDIOSO E L. GRIPPO, *Stopping criteria for linesearch methods without derivatives*, Math. Program., 30 (1984), pp. 285–300.
- [34] J. E. DENNIS JR., C. J. PRICE E I. D. COOPE, *Direct search methods for nonlinearly constrained optimization using filters and frames*, Optim. Eng., 5 (2004), pp. 123–144.
- [35] J. E. DENNIS JR. E R. B. SCHNABEL, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, New Jersey, 1983. Reeditado por SIAM, Filadélfia, 1996.
- [36] J. E. DENNIS JR. E V. TORCZON, *Direct search methods on parallel machines*, SIAM J. Optim., 1 (1991), pp. 448–474.

- [37] M. A. DINIZ-EHRHARDT, J. M. MARTÍNEZ E M. RAYDAN, *A derivative-free non-monotone line search technique for unconstrained optimization*, Relatório Técnico RT-2006-10, Centro de Cálculo Científico y Tecnológico, Escuela de Computación, Universidad Central de Venezuela, Venezuela, 2006.
- [38] E. D. DOLAN, R. M. LEWIS E V. TORCZON, *On the local convergence of pattern search*, SIAM J. Optim., 14 (2003), pp. 567–583.
- [39] R. A. DONAHUE, *Surface Differential Rotation in a Sample of Cool Dwarf Stars*, Tese de Doutorado, New Mexico State University, EUA, 1993.
- [40] E. FERMI E N. METROPOLIS, *Los Alamos unclassified report LS-1492*, relatório técnico, Los Alamos National Laboratory, EUA, 1952.
- [41] J. FERNANDES E N. C. SANTOS, *Detailed theoretical models for extra-solar planet-host stars: The “red stragglers” HD37124 and HD46375*, Astronom. Astrophys., 427 (2004), pp. 607–612.
- [42] M. C. FERRIS, S. LUCIDI E M. ROMA, *Nonmonotone curvilinear line search methods for unconstrained optimization*, Optim. Methods Softw., 14 (2000), pp. 75–98.
- [43] R. FLETCHER E S. LEYFFER, *Nonlinear programming without a penalty function*, Math. Program., 91 (2002), pp. 239–269.
- [44] R. FLETCHER, S. LEYFFER E PH. L. TOINT, *A brief history of filter methods*, SIAG/OPT Views-and-News, 18 (1) (2007), pp. 2–12.
- [45] L. FRIMANNSLUND E T. STEIHAUG, *A generating set search method using curvature information*, Comput. Optim. Appl., 38 (2007), pp. 105–121.
- [46] U. M. GARCÍA-PALOMARES E J. F. RODRÍGUEZ, *New sequential and parallel derivative-free algorithms for unconstrained minimization*, SIAM J. Optim., 13 (2002), pp. 79–96.
- [47] D. GOLDFARB, *Curvilinear path steplength algorithms for minimization which use directions of negative curvature*, Math. Program., 18 (1980), pp. 31–40.
- [48] N. I. M. GOULD, S. LUCIDI, M. ROMA E PH. L. TOINT, *Exploiting negative curvature directions in linesearch methods for unconstrained optimization*, Optim. Methods Softw., 14 (2000), pp. 75–98.

- [49] N. I. M. GOULD, D. ORBAN E PH. L. TOINT, *CUTEr and SifDec: A constrained and unconstrained testing environment, revisited*, ACM Trans. Math. Software, 29 (2003), pp. 373–394.
- [50] A. O. GRIEWANK, *On automatic differentiation*, em Mathematical Programming: Recent Developments and Applications, M. Iri e T. Tanabe, eds., Kluwer Academic, Dordrecht, 1989, pp. 83–108.
- [51] L. GRIPPO, F. LAMPARIELLO E S. LUCIDI, *Global convergence and stabilization of unconstrained minimization methods without derivatives*, J. Optim. Theory Appl., 56 (1988), pp. 385–406.
- [52] M. HAARALA, *Large-Scale Nonsmooth Optimization*, Tese de Doutorado, University of Jyväskylä, Finlândia, 2004.
- [53] N. J. HIGHAM, *A survey of condition number estimation for triangular matrices*, SIAM Rev., 29 (1987), pp. 575–596.
- [54] R. HOOKE E T. A. JEEVES, *“Direct search” solution of numerical and statistical problems*, J. ACM, 8 (1961), pp. 212–229.
- [55] R. A. HORN E C. R. JOHNSON, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [56] P. D. HOUGH, T. G. KOLDA E V. J. TORCZON, *Asynchronous parallel pattern search for nonlinear optimization*, SIAM J. Sci. Comput., 23 (2001), pp. 134–156.
- [57] C. T. KELLEY, *Iterative Methods for Optimization*, SIAM, Filadélfia, 1999.
- [58] T. G. KOLDA, R. M. LEWIS E V. TORCZON, *Optimization by direct search: New perspectives on some classical and modern methods*, SIAM Rev., 45 (2003), pp. 385–482.
- [59] ———, *A generating set direct search augmented Lagrangian algorithm for optimization with a combination of general and linear constraints*, Relatório Técnico SAND2006-5315, Sandia National Laboratories, EUA, 2006.
- [60] ———, *Stationarity results for generating set search for linearly constrained optimization*, SIAM J. Optim., 17 (2006), pp. 943–968.
- [61] F. LEMEIRE, *Bounds for condition numbers of triangular and trapezoid matrices*, BIT, 15 (1975), pp. 58–64.

- [62] R. M. LEWIS, A. SHEPHERD E V. TORCZON, *Implementing generating set search methods for linearly constrained minimization*, SIAM J. Sci. Comput., a aparecer.
- [63] R. M. LEWIS E V. TORCZON, *Rank ordering and positive bases in pattern search algorithms*, Relatório Técnico 96-71, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, EUA, 1996.
- [64] —, *Pattern search algorithms for bound constrained minimization*, SIAM J. Optim., 9 (1999), pp. 1082–1099.
- [65] —, *Pattern search methods for linearly constrained minimization*, SIAM J. Optim., 10 (2000), pp. 917–941.
- [66] —, *A globally convergent augmented Lagrangian pattern search algorithm for optimization with general constraints and simple bounds*, SIAM J. Optim., 12 (2002), pp. 1075–1089.
- [67] R. M. LEWIS, V. TORCZON E M. W. TROSSET, *Direct search methods: Then and now*, J. Comput. Appl. Math., 124 (2000), pp. 191–207.
- [68] G. LIUZZI E S. LUCIDI, *A derivative-free algorithm for nonlinear programming*, Relatório Técnico DIS 17-05, Università di Roma “La Sapienza”, Itália, 2005.
- [69] S. LUCIDI E M. SCIANDRONE, *On the global convergence of derivative-free methods for unconstrained optimization*, SIAM J. Optim., 13 (2002), pp. 97–116.
- [70] S. LUCIDI, M. SCIANDRONE E P. TSENG, *Objective-derivative-free methods for constrained optimization*, Math. Program., 92 (2002), pp. 37–59.
- [71] L. LUKŠAN E J. VLČEK, *Test problems for nonsmooth unconstrained and linearly constrained optimization*, Relatório Técnico 798, Institute of Computer Science, Academy of Sciences of the Czech Republic, República Checa, 2000.
- [72] A. L. MARSDEN, M. WANG, J. E. DENNIS JR. E P. MOIN, *Optimal aeroacoustic shape design using the surrogate management framework*, Optim. Eng., 5 (2004), pp. 235–262.
- [73] J. A. C. MARTINS, S. BARBARIN, M. RAOUS E A. PINTO DA COSTA, *Dynamic stability of finite dimensional linearly elastic systems with unilateral contact and Coulomb friction*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 177 (1999), pp. 289–328.
- [74] G. P. MCCORMICK, *A modification of Armijo’s step-size rule for negative curvature*, Math. Program., 13 (1977), pp. 111–115.

- [75] R. MIFFLIN, *A superlinearly convergent algorithm for minimization without evaluating derivatives*, Math. Program., 9 (1975), pp. 100–117.
- [76] J. J. MORÉ, B. S. GARBOW E K. E. HILLSTROM, *Testing unconstrained optimization software*, ACM Trans. Math. Software, 7 (1981), pp. 17–41.
- [77] J. J. MORÉ E D. C. SORESENSEN, *On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method*, Math. Program., 16 (1979), pp. 1–20.
- [78] P. MOREL, *CESAM: A code for stellar evolution calculations*, Astronom. Astrophys. Suppl. Ser., 124 (1997), pp. 597–614.
- [79] J. A. NELDER E R. MEAD, *A simplex method for function minimization*, Comput. J., 7 (1965), pp. 308–313.
- [80] J. NOCEDAL E S. J. WRIGHT, *Numerical Optimization*, Springer, Nova Iorque, segunda edição, 2006.
- [81] M. J. D. POWELL, *An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives*, Comput. J., 7 (1964), pp. 155–162.
- [82] ———, *A new algorithm for unconstrained optimization*, em Nonlinear Programming, J. B. Rosen, O. L. Mangasarian e K. Ritter, eds., Academic Press, Nova Iorque, 1970.
- [83] C. J. PRICE E PH. L. TOINT, *Exploiting problem structure in pattern search methods for unconstrained optimization*, Optim. Methods Softw., 21 (2006), pp. 479–491.
- [84] R. T. ROCKAFELLER, *Convex Analysis*, Princeton University Press, Princeton, 1970.
- [85] H. H. ROSENBROCK, *An automatic method for finding the greatest or least value of a function*, Comput. J., 3 (1960), pp. 175–184.
- [86] W. SPENDLEY, G. R. HEXT E F. R. HIMSWORTH, *Sequential application of simplex designs in optimisation and evolutionary operation*, Technometrics, 4 (1962), pp. 441–461.
- [87] S. W. THOMAS, *Sequential Estimation Techniques for Quasi-Newton Algorithms*, Tese de Doutorado, Department of Computer Science, Cornell University, EUA, 1975.
- [88] V. TORCZON, *Multi-Directional Search: A Direct Search Algorithm for Parallel Machines*, Tese de Doutorado, Department of Mathematical Sciences, Rice University, EUA, 1989.

- [89] —, *On the convergence of the multidirectional search algorithm*, SIAM J. Optim., 1 (1991), pp. 123–145.
- [90] —, *On the convergence of pattern search algorithms*, SIAM J. Optim., 7 (1997), pp. 1–25.
- [91] A. I. F. VAZ E L. N. VICENTE, *A particle swarm pattern search method for bound constrained global optimization*, J. Global Optim., a aparecer.
- [92] D. WINFIELD, *Function and Functional Optimization by Interpolation in Data Tables*, Tese de Doutorado, Harvard University, EUA, 1969.
- [93] T. A. WINSLOW, R. J. TREW, P. GILMORE E C. T. KELLEY, *Doping profiles for optimum class B performance of GaAs MESFET amplifiers*, em Proceedings IEEE/Cornell Conference on Advanced Concepts in High Speed Devices and Circuits, 1991, pp. 188–197.
- [94] M. H. WRIGHT, *Direct search methods: Once scorned, now respectable*, em Numerical Analysis 1995 (Proceedings of the 1995 Dundee Biennial Conference in Numerical Analysis), D. F. Griffiths e G. A. Watson, eds., vol. 10, Addison Wesley Longman, Harlow, 1996, pp. 191–208.
- [95] W. YU, *Positive basis and a class of direct search techniques*, Scientia Sinica, 1 (1979), pp. 53–67.
- [96] Z. ZHAO, J. C. MEZA E M. VAN HOVE, *Using pattern search methods for surface structure determination of nanomaterials*, J. Phys.: Condens. Matter, 18 (2006), pp. 8693–8706.