

Método do Gradiente Espectral Projetado para minimização em caixas

Marina Andretta

ICMC-USP

13 de outubro de 2014

Problema com restrições de caixa

Vamos nos concentrar em problemas apenas com **restrições de caixa**. Ou seja, estamos interessados em resolver o seguinte problema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{Sujeita a} & x \in \Omega = \{x \mid \ell \leq x \leq u\}, \end{array} \quad (1)$$

onde

- $x, \ell, u \in (\mathbf{R} \cup \{-\infty, +\infty\})^n$,
- $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ função suave.

Problema com restrições de caixa

Como vimos, as condições necessárias de primeira ordem para que um ponto x^* seja solução para um problema do tipo

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ \text{Sujeita a} & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \\ & c_i(x) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}, \end{array} \quad (2)$$

com restrições satisfazendo LICQ, é que exista um vetor λ^* tal que as condições KKT sejam satisfeitas. Ou seja,

$$\begin{array}{ll} \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) & = 0, \\ c_i(x^*) & = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \\ c_i(x^*) & \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \\ \lambda_i^* & \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}, \\ \lambda_i^* c_i(x^*) & = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}. \end{array} \quad (3)$$

Problema com restrições de caixa

A condição **LICQ** é a seguinte: dados um ponto x^* e o conjunto de restrições ativas $\mathcal{A}(x^*)$, dizemos que a condição de qualificação de restrição de independência linear (LICQ) vale se o conjunto dos gradientes das restrições ativas $\{\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{A}(x^*)\}$ é **linearmente independente**.

Note que, no caso do **problema (1)**, que tem apenas restrições de caixa, a condição **LICQ sempre pode ser satisfeita**.

Problema com restrições de caixa

O gradiente de cada restrição é uma coluna da matriz identidade multiplicada por 1 ou -1.

Dois gradientes de restrições ativas seriam **linearmente dependentes** apenas quando uma variável x_i fosse igual tanto a seu limitante inferior como ao seu limitante superior. Ou seja, **apenas quando $\ell_i = x_i = u_i$** .

Neste caso, a **variável x_i é fixa** e a restrição $\ell_i \leq x_i \leq u_i$ pode ser eliminada do problema.

Consideraremos, daqui em diante, apenas problemas (1) com $\ell_i < u_i$, para todo i .

Problema com restrições de caixa

Assim, as condições necessárias de primeira ordem para que um ponto x^* seja solução de (1) são

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_\ell} \lambda_i^* e_i + \sum_{i \in \mathcal{I}_u} \mu_i^* e_i &= 0, \\ x_i - \ell_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_\ell, \\ u_i - x_i &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \\ \lambda_i^* &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_\ell, \\ \mu_i^* &\geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \\ \lambda_i^* (x_i - \ell_i) &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_\ell, \\ \mu_i^* (u_i - x_i) &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}_u, \end{aligned} \tag{4}$$

com \mathcal{I}_ℓ e \mathcal{I}_u conjunto dos índices das restrições $\ell_i \leq x_i$, $\ell_i \in \mathbf{R}$ e $x_i \leq u_i$, $u_i \in \mathbf{R}$, respectivamente. e_i i -ésima coluna da matriz identidade.

Antes de prosseguir, vamos definir a **projeção ortogonal** de um ponto x no conjunto viável Ω . Esta será denotada por $P_{\Omega}(x)$.

$$P_{\Omega}(x) = \begin{cases} x_i, & \text{se } l_i \leq x_i \leq u_i, \\ l_i, & \text{se } x_i < l_i, \\ u_i, & \text{se } x_i > u_i. \end{cases}$$

Note que um ponto viável x^* **satisfaz**

$$P_{\Omega}(x^* - \nabla f(x^*)) - x^* = 0,$$

se e somente se este ponto x^* **também satisfaz as condições KKT** (exercício).

Método do Gradiente Espectral Projetado

O método do **Gradiente Espectral Projetado (SPG)** é usado para resolver o seguinte problema:

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeita a} & x \in \Omega, \end{array}$$

onde f é uma função em C^1 , $x \in \mathbf{R}^n$ e Ω é um conjunto convexo fechado.

Método do Gradiente Espectral Projetado

Estamos interessados no caso em que Ω é uma caixa.

A idéia do algoritmo é a seguinte: na iteração k , calculamos uma direção de descida $p_k \in \Omega$ e fazemos uma busca linear para que $x_k + \alpha_k p_k$ satisfaça a condição de Armijo.

Quando isso acontece, temos o novo ponto $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \in \Omega$.

A direção p_k é calculada com base na projeção ortogonal de $-\lambda_k \nabla f(x_k)$ no conjunto Ω , onde λ_k (chamado de passo espectral) é um escalar calculado a partir de informações fornecidas pelo ponto atual x_k e pelo ponto x_{k-1} da iteração anterior.

Método do Gradiente Espectral Projetado

Método SPG: Dados $x_0 \in \Omega$, $\epsilon > 0$, $0 < \lambda_{\min} < \lambda_{\max} < \infty$, $c \in (0, \frac{1}{2})$, $0 < \rho_1 < \rho_2 < 1$.

Passo 1: Faça $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Se $\|P_{\Omega}(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k\| \leq \epsilon$, pare com x_k como solução.

Passo 3: Calcule $s_k = x_k - x_{k-1}$ e $y_k = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$.

Passo 4: Se $s_k^T y_k \leq 0$ então
faça $\lambda_k \leftarrow \lambda_{\max}$.

Senão

$$\text{faça } \lambda_k \leftarrow \min \left\{ \lambda_{\max}, \max \left\{ \lambda_{\min}, \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} \right\} \right\}.$$

Passo 5: Calcule $p_k = P_{\Omega}(x_k - \lambda_k \nabla f(x_k)) - x_k$.

Método do Gradiente Espectral Projetado

Passo 6: Faça $\alpha \leftarrow 1$.

Passo 7: Se $f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + c\alpha \nabla f_k^T p_k$ então
faça $\alpha_k \leftarrow \alpha$.

Senão

faça $\alpha \leftarrow \alpha_{novo} \in [\rho_1\alpha, \rho_2\alpha]$ e repita o Passo 7.

Passo 8: Faça $x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k p_k$.

Passo 9: Faça $k \leftarrow k + 1$.

Passo 10: Volte para o Passo 2.

Método do Gradiente Espectral Projetado

O valor obtido para λ_k possui alguma informação de segunda ordem da função objetivo. Na verdade, temos que

$$\left(\frac{1}{\lambda_k}\right) I = \underset{D}{\operatorname{argmin}} \quad \|Ds_k - y_k\|$$

sujeita a $D = \gamma I,$

onde I é a matriz identidade.

Ou seja, $\left(\frac{1}{\lambda_k}\right) I$ é a matriz diagonal que melhor aproxima a equação **secante** (equação esta que é uma aproximação da hessiana da função objetivo).

Quanto à convergência do algoritmo do Gradiente Espectral Projetado, temos que todo ponto de acumulação da sequência $\{x_k\}$ gerada por ele é um ponto estacionário restrito.

Uma maneira de calcular λ_0 é calcular um \bar{x} dando um passo muito pequeno a partir de x_0 na direção de $-\nabla f(x_0)$.

Neste caso, esperamos que a função objetivo decresça e satisfaça a condição de Armijo.

Por isso utilizamos, para calcular λ_0 , os mesmos passos usados para calcular λ_k , considerando \bar{x} como x_k e x_0 como x_{k-1} .

Cálculo do passo espectral inicial: Dados $\epsilon_{rel}, \epsilon_{abs} > 0$ e $x_0 \in \Omega$.

Passo 1: Calcule $\alpha_{peq} = \max\{\epsilon_{rel}\|x_0\|_\infty, \epsilon_{abs}\}$.

Passo 2: Calcule $\bar{x} = x_0 - \alpha_{peq} \nabla f(x_0)$.

Passo 3: Calcule $\bar{s} = \bar{x} - x_0$.

Passo 4: Calcule $\bar{y} = \nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x_0)$.

Passo 5: Se $\bar{s}^T \bar{y} \leq 0$ então
faça $\lambda_0 \leftarrow \lambda_{max}$.

Senão

faça $\lambda_0 \leftarrow \min \left\{ \lambda_{max}, \max \left\{ \lambda_{min}, \frac{\bar{s}^T \bar{s}}{\bar{s}^T \bar{y}} \right\} \right\}$.

Cálculo do tamanho de passo

Uma forma simples é calcular $\alpha \leftarrow \frac{\alpha_k}{2}$.

Uma forma mais interessante é utilizar a **interpolação quadrática uni-dimensional** $q(w)$ tal que $q(0) = f(x_k)$, $q(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$ e $\nabla q(0) = \nabla f(x_k)^T p_k$.

Para obter $\alpha_{\text{nov}}o$, calculamos o mínimo de $q(w)$ e fazemos a salvaguarda (lembre-se que estamos interessados em $\alpha_{\text{nov}}o \in [\rho_1 \alpha, \rho_2 \alpha]$).

A seguir estão os passos utilizados para a escolha de $\alpha_{\text{nov}}o$ utilizando a interpolação quadrática e salvaguarda:

Cálculo do tamanho de passo

Cálculo do tamanho de passo: Dados $p_k \in \mathbf{R}^n$ direção de descida, $\alpha > 0$ e $x_k \in \Omega$.

Passo 1: Calcule $\alpha_{tent} = -\frac{\alpha^2 \nabla f(x_k)^T p_k}{2(f(x_k + \alpha p_k) - f(x_k) - \alpha \nabla f(x_k)^T p_k)}$.

Passo 2: Se $(\alpha_{tent} \geq \rho_1 \alpha)$ e $(\alpha_{tent} \leq \rho_2 \alpha)$ então
faça $\alpha_{novo} \leftarrow \alpha_{tent}$.

Senão

faça $\alpha_{novo} \leftarrow \frac{\alpha}{2}$.