Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n. 1, 2025.

Trabalho apresentado no XLIII CNMAC, Centro de Convenções do Armação Resort - Porto de Galinhas - PE, 2024

Estudo Comparativo entre Buscas Lineares Não Monotônicas Empregadas no Método do Gradiente Espectral Projetado em Conjuntos Convexos

Samara V. V. Dias[1], Marcio A. A. Bortoloti[2]
UESB, Vitória da Conquista, BA

Desde o seu surgimento, o Método do Gradiente Espectral Projetado (SPG) tem sido amplamente aplicado em diversas áreas, como na resolução de problemas de tomografia de reflexão sísmica, [2]. Esse método requer estratégias adequadas, denominadas de buscas lineares, para o fornecimento de comprimentos de passo que assegurem boas propriedades de convergência da sequência gerada. Neste trabalho, analisaremos buscas lineares não monotônicas para minimização de funções em conjuntos convexos fechados definidos por restrições de limitação das variáveis.

O método SPG, introduzido em [3], representa uma variante aprimorada do Método do Gradiente Projetado (PG). Ele incorpora duas adaptações em relação ao método PG: a utilização do passo espectral de Barzilai e Borwein, conforme apresentado em [1], e a integração de uma busca linear não monótona. A fim de realizar um estudo comparativo, consideramos a busca de Grippo, Lampariello e Lucidi (GLL), descrita em [6], e a busca proposta por Birgin, Martínez e Raydan em [3], que chamaremos de BMR. Quando o SPG for equipado com a busca GLL, referimo-nos a ele como SPG1; enquanto que equipado com a busca BMR, será denominado SPG2. Estes métodos serão comparados na minimização de funções do tipo $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciáveis em um conjunto aberto que contém Ω, onde Ω é um conjunto convexo e fechado em $\mathbb{R}^n$.

No método SPG1, vamos considerar o comprimento de passo inicial $\alpha_0 = \lambda_0 \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, onde $\lambda_{\max} > \lambda_{\min} > 0$. Além disso, para todo $k > 0$, iniciaremos a busca linear com $\alpha_k = \lambda_k$, o passo espectral. Dados $\gamma \in (0, 1)$ e um inteiro $M > 0$, a busca GLL consiste em determinar um comprimento de passo $\alpha_k > 0$ tal que

$$f(P_\Omega(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k))) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{k, M-1\}} f(x_{k-j}) + \gamma \nabla f(x_k)^\top (P_\Omega(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) - x_k), \quad (1)$$

onde $P_\Omega : \mathbb{R}^n \to \Omega$ é uma projeção ortogonal. Já no método SPG2, iniciaremos calculando a direção $d_k = P_\Omega(x_k - \lambda_k \nabla f(x_k)) - x_k$, onde $\lambda_0 \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ e λ_k é o passo espectral, para todo $k > 0$. Em seguida, a busca BMR determina um comprimento de passo $\alpha_k > 0$ tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{k, M-1\}} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k \nabla f(x_k)^\top d_k. \quad (2)$$

Vale ressaltar que, se α_k não satisfizer (1) ou não satisfizer (2) para algum $k \in \mathbb{N}$, será feito um ajuste em α_k por meio de uma interpolação quadrática, como pode ser visto em [4].

Observe que em (1), o cálculo do produto $(P_\Omega(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) - x_k)^\top \nabla f(x_k)$ é feito para cada ponto teste $P_\Omega(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k))$, o que causa um aumento no esforço computacional, devido ao emprego sucessivo de projeções. Além disso, na formulação do SPG1, ao projetar pontos próximos da fronteira do conjunto Ω pode-se obter pontos teste consecutivos em que a distância entre eles seja muito pequena ou até nula, [3]. Essas considerações levaram à formulação do SPG2 por Birgin,

[1]samaravvilar@gmail.com
[2]mbortoloti@uesb.edu.br

Martínez e Raydan, um algoritmo que, ao rejeitar o primeiro ponto de teste, calcula os próximos ao longo da mesma direção, resultando em um único cálculo da direção d_k e uma única operação de projeção por iteração.

O Algoritmo 1 a seguir apresenta formalmente os métodos SPG1 e SPG2.

Algoritmo 1: MÉTODO DO GRADIENTE ESPECTRAL PROJETADO (SPG)

1. Considere $x_0 \in \Omega$, um inteiro $M > 0$, $\lambda_{\max} > \lambda_{\min} > 0$, $\gamma \in (0,1)$, $1 > \sigma_2 > \sigma_1 > 0$ e $\varepsilon > 0$.
2. Faça $k = 0$.
3. Se $\|P_\Omega(x_k - \nabla f(x_k)) - x_k\|_\infty \leq \varepsilon$, então pare.
4. Calcule α_k por (1) e faça $x_{k+1} = P_\Omega(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k))$, para o SPG1; ou calcule α_k por (2) e faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, para o SPG2.
5. Se (1) não for válida ou (2) não for válida, tome $\alpha_{\text{new}} \in [\sigma_1 \alpha_k, \sigma_2 \alpha_k]$, faça $\alpha_k = \alpha_{\text{new}}$ e retorne para o passo 4.
6. Calcule $s_k = x_{k+1} - x_k$ e $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$.
7. Se $s_k^\top y_k \leq 0$, então faça $\lambda_{k+1} = \lambda_{\max}$. Caso contrário, faça $\lambda_{k+1} = \max\{\lambda_{\min}, \min\{s_k^\top s_k / s_k^\top y_k, \lambda_{\max}\}\}$. Faça $k = k + 1$ e retorne para o passo 3.

Os experimentos numéricos foram desenvolvidos a partir de problemas com restrições de limitação das variáveis da coleção CUTEst, [5], com dimensões menores ou iguais a 15625. A escolha dos problemas foi feita a partir daqueles apresentados em [3]. Ademais, os códigos utilizados neste trabalho, implementados na linguagem de programação Julia, estão livremente disponibilizados em `https://github.com/petimatematica/SPG`. Por meio de *performance profiles*, apresentaremos um estudo comparativo sobre os comportamentos das buscas lineares não monotônicas empregadas no método SPG referente a tempo de CPU, número de iterações e avaliação de função.

Agradecimentos

A autora Samara Viriato Vilar Dias agradece ao Programa de Educação Tutorial Institucional da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (PETI/UESB) pela bolsa de estudos.

Referências

[1] J. Barzilai e J. M. Borwein. “Two-point step size gradient methods”. Em: **IMA journal of numerical analysis** 8.1 (1988), pp. 141–148.

[2] L. Bello e M. Raydan. “Convex constrained optimization for the seismic reflection tomography problem”. Em: **Journal of Applied Geophysics** 62.2 (2007), pp. 158–166.

[3] E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. Raydan. “Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets”. Em: **SIAM Journal on Optimization** 10.4 (2000), pp. 1196–1211.

[4] E. G. Birgin, J. M. Martínez e M. Raydan. “Spectral projected gradient methods: review and perspectives”. Em: **Journal of Statistical Software** 60 (2014), pp. 1–21.

[5] N. I. Gould, D. Orban e P. L. Toint. “CUTEst: a constrained and unconstrained testing environment with safe threads for mathematical optimization”. Em: **Computational optimization and applications** 60 (2015), pp. 545–557.

[6] L. Grippo, F. Lampariello e S. Lucidi. “A nonmonotone line search technique for Newton’s method”. Em: **SIAM journal on Numerical Analysis** 23.4 (1986), pp. 707–716.