

# Métodos de regiões de confiança

Marina Andretta

ICMC-USP

05 de outubro de 2010

Veremos agora métodos de **regiões de confiança** para resolução de problemas de minimização irrestrita, ou seja,

$$\text{Minimizar } f(x)$$

(1)

onde

- $x \in \mathbf{R}^n$ ;
- $f \in \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$  uma função suave.

# Métodos de regiões de confiança

Tanto métodos de busca linear como de regiões de confiança usam um modelo quadrático da função objetivo, mas de maneiras diferentes.

Métodos de busca linear usam o modelo quadrático no cálculo da direção de busca e depois se concentram em encontrar o tamanho de passo para andar nesta direção.

Métodos de região de confiança definem uma região dentro da qual acreditam que o modelo quadrático é uma boa aproximação da função objetivo e, então, calculam o minimizador do modelo nesta região. A direção e o tamanho de passo são calculados simultaneamente.

Se o passo não for aceito, o raio da região de confiança é reduzido e calcula-se uma nova direção. Assim, a direção muda sempre que o raio é modificado.

O raio da região de confiança é muito importante:

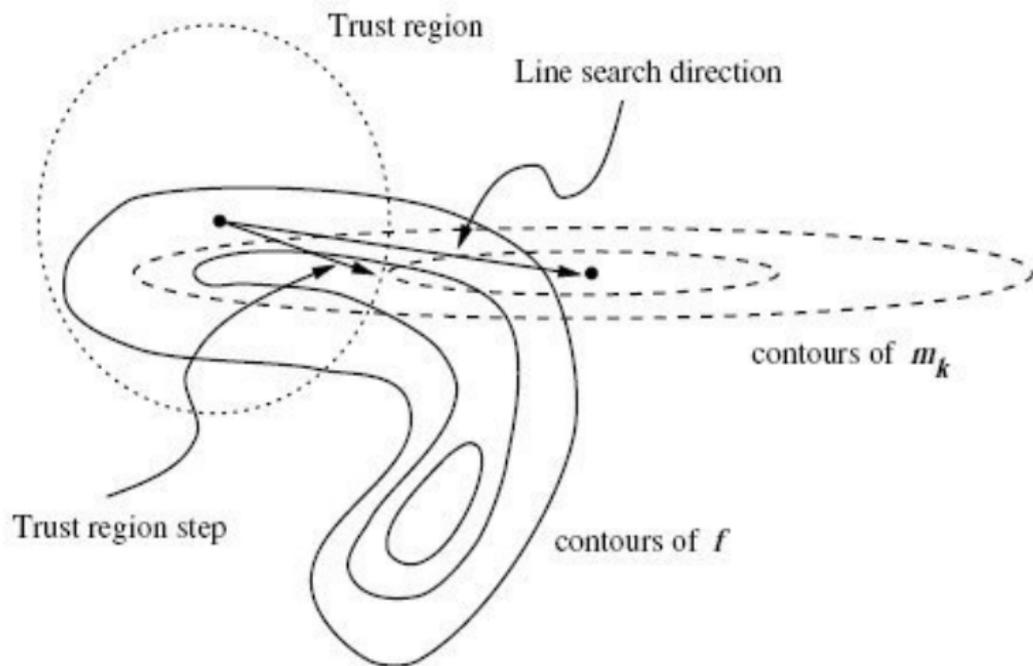
- Se ele for muito grande, o modelo quadrático pode estar muito longe da função objetivo e, então, o minimizador do modelo quadrático pode não produzir decréscimo suficiente, o raio deve ser diminuído e o minimizador do modelo recalculado.
- Por outro lado, se o raio da região de confiança for muito pequeno, podem ser calculados passos muito pequenos e, então, são necessárias muitas iterações de regiões de confiança para que a solução do problema (1) seja encontrada.

# Métodos de regiões de confiança

Na prática, escolhemos o raio da região de confiança de acordo com o resultado obtido em cada iteração:

- Se o modelo quadrático se mostra adequado para aproximar a função objetivo, o raio é mantido ou aumentado.
- Se o modelo quadrático se mostra uma aproximação ruim, o raio é reduzido.

# Métodos de regiões de confiança



*Nocedal & Wright, 1999*

Figura: Regiões de confiança e busca linear (figura 4.1 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright)

Supomos que os primeiros dois termos dos modelos quadráticos  $m_k$  em cada iterando  $x_k$  são idênticos aos primeiros dois termos da expansão de Taylor de  $f$  em torno de  $x_k$ . Ou seja,

$$\begin{aligned}m_k(p) &= f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \\ &= f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + O(\|p\|^2),\end{aligned}$$

onde  $B_k$  é uma matriz simétrica.

Como

$$f(x_k + p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x_k + tp) p,$$

para um escalar  $t \in (0, 1)$ , a diferença entre  $m_k$  e  $f(x_k + p)$  é  $O(\|p\|^2)$ .

Assim, o erro da aproximação é muito pequeno quando  $p$  é pequeno.

# Métodos de regiões de confiança

Quando  $B_k$  é a Hessiana verdadeira  $\nabla^2 f(x_k)$ , o modelo quadrático é igual a expansão de Taylor em 3 termos, o que dá um erro de  $O(\|p\|^3)$ .

O método baseado em  $B_k = \nabla^2 f(x_k)$  é chamado de método de Newton de regiões de confiança.

Daqui em diante, não nos preocuparemos com a definição da matriz  $B_k$ .

Para a obtenção de cada passo, procuramos a solução do subproblema

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \\ \text{Sujeita a} & \|p\| \leq \Delta_k, \end{array} \quad (2)$$

onde  $\Delta_k$  é o raio da região de confiança e  $\|\cdot\|$  é a norma euclidiana.

A solução  $p_k^*$  de (2) é o minimizador de  $m_k$  na bola de raio  $\Delta_k$ .

Assim, o método de regiões de confiança precisa que seja resolvida uma seqüência de subproblemas (2) nos quais tanto a função objetivo como a restrição são quadráticas.

Quando  $B_k$  é definida positiva e  $\|B_k^{-1}\nabla f(x_k)\| \leq \Delta_k$ , a solução de (2) é fácil de ser identificada. É, simplesmente, o minimizador irrestrito  $p_k^B = -B_k^{-1}\nabla f(x_k)$  do modelo quadrático  $m_k(p)$ .

Neste caso, chamamos  $p_k^B$  de passo completo.

Em outros casos, a solução de (2) não é óbvia, mas, geralmente, pode ser encontrada sem muito custo.

De qualquer forma, para garantir convergência e bons resultados práticos, é necessário apenas uma aproximação da solução de (2).

# Métodos de regiões de confiança

Para definir o método de regiões de confiança, é preciso escolher como atualizar o raio da região de confiança  $\Delta_k$  a cada iteração.

Baseamos essa atualização na concordância entre o decréscimo obtido na função objetivo e o decréscimo do modelo quadrático na iteração anterior.

Dado um passo  $p_k$ , definimos

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)}.$$

Chamamos o numerador de redução real (*actual reduction*) e o denominador de redução predita (*predicted reduction*).

# Métodos de regiões de confiança

Note que, como o passo  $p_k$  é calculado minimizando o modelo  $m_k$  numa região que inclui  $p = 0$ , a **redução predita sempre é não-negativa**.

Assim, se  $\rho_k$  é **negativo**, significa que o valor de  $f(x_k + p_k)$  é maior que  $f(x_k)$ , e o **passo deve ser rejeitado**.

Por outro lado, se  $\rho_k$  é **perto de 1**, o modelo quadrático  $m_k$  é uma boa aproximação para a função objetivo  $f$  neste ponto e, assim, é seguro **aumentar o raio da região de confiança** para a próxima iteração.

Se  $\rho_k$  é positivo, mas não está próximo de 1, não alteramos o raio de região de confiança.

# Métodos de regiões de confiança

**Método de regiões de confiança:** Dados  $\bar{\Delta} > 0$ ,  $\Delta_0 \in (0, \bar{\Delta})$ ,  $\eta \in [0, \frac{1}{4})$ , um ponto inicial  $x^{(0)}$  e um escalar  $\epsilon > 0$ .

**Passo 1:** Faça  $k \leftarrow 0$ .

**Passo 2:** Se  $\|\nabla f(x_k)\| \leq \epsilon$ , então pare e devolva  $x_k$  como solução.

**Passo 3:** Calcule  $p_k$  uma solução aproximada de (2).

**Passo 4:** Calcule  $\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)}$ .

**Passo 5:** Se  $\rho_k < \eta$ , então faça  $\Delta_k = \frac{1}{4}\|p_k\|$  e volte para o Passo 3.

**Passo 6:** Se  $\rho_k < \frac{1}{4}$ , então faça  $\Delta_{k+1} = \frac{1}{4}\|p_k\|$ .

Senão

Se  $\rho_k > \frac{3}{4}$  e  $\|p_k\| = \Delta_k$ , então faça  $\Delta_{k+1} = \min(2\Delta_k, \bar{\Delta})$ .

Senão, faça  $\Delta_{k+1} = \Delta_k$

**Passo 7:** Faça  $x_{k+1} \leftarrow x_k + p_k$ .

**Passo 8:** Faça  $k \leftarrow k + 1$  e volte para o Passo 2.

# Métodos de regiões de confiança

Neste método,  $\bar{\Delta}$  é um limitante para o tamanho do passo.

Note que o raio da região de confiança só é aumentado quando o passo  $p_k$  atinge, de fato, a borda da região de confiança.

Quando a borda não é atingida, pode-se inferir que o tamanho da região de confiança não está atrapalhando o cálculo do passo e, por isso, o raio  $\Delta_k$  é mantido para a próxima iteração.

Para completar a definição do método é necessária uma maneira de executar o Passo 2. Veremos como isto pode ser feito de duas maneiras que garantem a convergência do método: usando **ponto de Cauchy** e o **método dogleg**.

Lembrando que, para executar o Passo 2 do método de regiões de confiança, precisamos calcular a solução para o subproblema

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \\ \text{Sujeita a} & \|p\| \leq \Delta_k, \end{array} \quad (3)$$

onde  $\Delta_k$  é o raio da região de confiança e  $\|\cdot\|$  é a norma euclidiana.

Foi visto que para métodos de busca linear serem globalmente convergente não é necessário ser calculado tamanho de passo ótimo. O mesmo se aplica a métodos de regiões de confiança.

Apesar de, em princípio, querermos calcular a solução ótima de (3), é suficiente para convergência global do método que seja calculada uma aproximação de  $p_k$  que esteja dentro da região de confiança e que forneça decréscimo suficiente do modelo quadrático.

O decréscimo suficiente pode ser quantificado pelo **ponto de Cauchy**, denotado  $p_k^C$ , calculado da seguinte maneira:

**Cálculo do ponto de Cauchy:** Dado  $\Delta_k > 0$ .

**Passo 1:** Calcule  $p_k^S$  solução da versão linear de (3)

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p \\ \text{Sujeita a} & \|p\| \leq \Delta_k. \end{array}$$

**Passo 2:** Calcule o escalar  $\tau_k > 0$  solução de

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & m_k(\tau p_k^S) \\ \text{Sujeita a} & \|\tau p_k^S\| \leq \Delta_k. \end{array}$$

**Passo 3:** Faça  $p_k^C = \tau_k p_k^S$ .

Há uma fórmula fechada para o cálculo de  $p_k^C$ .

No Passo 1,  $p_k^S = -\frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|} \nabla f(x_k)$ .

Para calcular  $\tau_k$  no Passo 2 é necessário considerar 2 casos:

- Se  $\nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k) \leq 0$ , a função  $m_k(\tau p_k^S)$  decresce conforme  $\tau$  cresce, para  $\nabla f(x_k) \neq 0$ . Assim,  $\tau_k$  é o maior escalar que faz  $\tau_k p_k^S$  permanecer na região de confiança. Ou seja,  $\tau_k = 1$ .
- Se  $\nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k) > 0$ , a função  $m_k(\tau p_k^S)$  é uma quadrática convexa, então ou  $\tau_k$  é o minimizador irrestrito da quadrática  $\|\nabla f(x_k)\|^3 / (\Delta_k \nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k))$  ou  $p_k^C$  está na borda (ou seja,  $\tau_k = 1$ ), o que vier antes.

Resumindo,

$$p_k^C = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x_k)\|} \nabla f(x_k),$$

com

$$\tau_k = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k) \leq 0 \\ \min \left( 1, \frac{\|\nabla f(x_k)\|^3}{(\Delta_k \nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k))} \right) & , \text{ caso contrário.} \end{cases}$$

# Ponto de Cauchy

O ponto de Cauchy é fácil de ser calculado e tem muita importância para decidir se a aproximação da solução de (3) é aceitável.

Na verdade, um método de regiões de confiança é globalmente convergente se os passos  $p_k$  obtém, em cada iteração, decréscimo do modelo quadrático  $m_k$  de, pelo menos, um múltiplo do decréscimo obtido pelo ponto de Cauchy.

Apesar de fácil de calcular e de produzir decréscimo do modelo quadrático, **usar sempre o ponto de Cauchy como passo produz um método de máxima descida com um tamanho de passo particular.** Como visto, mesmo quando os tamanhos de passo usados são ótimos, métodos de máxima descida têm convergência lenta.

O ponto de Cauchy não depende fortemente de  $B_k$ , que é usada apenas no cálculo do tamanho do passo. Para obter convergência rápida (superlinear, por exemplo), é necessário usar  $B_k$  também no cálculo do passo  $p_k$ .

Há vários métodos que começam a aproximação da solução de (3) com o ponto de Cauchy e tentam melhorar esta aproximação.

Em geral, tenta-se usar o passo completo  $p_k^B = -B_k^{-1}\nabla f(x_k)$  sempre que  $B_k$  é definida positiva e  $\|p_k^B\| \leq \Delta_k$ . Em particular, quando  $B_k$  é a Hessiana verdadeira ou uma aproximação quase-Newton, espera-se um método deste tipo tenha convergência superlinear.

Lembrando que estamos interessados em resolver o seguinte subproblema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \\ \text{Sujeita a} & \|p\| \leq \Delta_k, \end{array} \quad (4)$$

onde  $\Delta_k$  é o raio da região de confiança e  $\|\cdot\|$  é a norma euclidiana.

No caso do **método dogleg**, estamos interessados apenas no caso em que  $B_k$  é definida positiva.

# Método dogleg

A solução de (4) será denotada por  $p^*(\Delta_k)$ . Vejamos agora como o valor de  $\Delta_k$  afeta a solução de (4).

Quando  $B_k$  é definida positiva, o minimizador irrestrito de  $m_k$  é o passo completo  $p_k^B = -B_k^{-1}\nabla f(x_k)$ . Quando este ponto está na região de confiança, a solução é dada por

$$p^*(\Delta_k) = p_k^B, \text{ quando } \|p_k^B\| \leq \Delta_k.$$

# Método dogleg

Quando  $\Delta_k$  é pequeno, a restrição  $\|p\| \leq \Delta_k$  garante que a parte quadrática do modelo  $m_k$  não tem muita influência em seu valor. Neste caso, a solução verdadeira  $p^*(\Delta_k)$  pode ser aproximada pela solução de

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p \\ \text{Sujeita a} & \|p\| \leq \Delta_k, \end{array}$$

Ou seja,

$$p^*(\Delta_k) \approx -\Delta_k \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|}, \text{ quando } \Delta_k \text{ é pequeno.}$$

Para valores intermediários de  $\Delta_k$ , a solução  $p^*(\Delta_k)$  segue a trajetória mostrada na figura 4.3 de Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright.

# Método dogleg

O método dogleg calcula uma solução aproximada de (4), trocando a curva correta por uma aproximação composta por dois segmentos de reta.

O primeiro segmento vai da origem até o minimizador irrestrito na direção de máxima descida, definida por

$$p_k^U = -\frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k)} \nabla f(x_k).$$

O segundo segmento vai de  $p_k^U$  ao passo completo  $p_k^B$ .

Definimos então a **trajetória de dogleg**  $\tilde{p}_k(\tau)$ , para  $\tau \in [0, 2]$ , como

$$\tilde{p}_k(\tau) = \begin{cases} \tau p_k^U & , 0 \leq \tau \leq 1 \\ p_k^U + (\tau - 1)(p_k^B - p_k^U) & , 1 \leq \tau \leq 2 \end{cases}$$

O método dogleg escolhe  $p_k$  que minimiza o modelo  $m_k$  nesta trajetória, sujeito a  $p_k$  pertencer à região de confiança.

Não é necessário fazer uma busca para calcular  $p_k$ , pois a trajetória  $\tilde{p}_k$  intersecta a borda da região de confiança no máximo uma vez e este ponto de intersecção pode ser **calculado analiticamente**.

**Lema:** *Seja  $B_k$  definida positiva. Então*

- 1  $\|\tilde{p}_k(\tau)\|$  é uma função crescente de  $\tau$ , e
- 2  $m_k(\tilde{p}_k(\tau))$  é uma função decrescente de  $\tau$ .

Pelo lema anterior podemos ver que  $\tilde{p}_k(\tau)$  intersecta a borda da região de confiança  $\|p_k\| = \Delta_k$  em exatamente um ponto se  $\|p_k^B\| \geq \Delta_k$ .

Como  $m_k$  decresce ao longo da trajetória,  $p_k$  será igual a  $p_k^B$  quando  $\|p_k^B\| \leq \Delta_k$  e o ponto de intersecção com a borda, caso contrário.

Para calcular o ponto de intersecção, basta calcular  $\tau$  solução de

$$\|p_k^U + (\tau - 1)(p_k^B - p_k^U)\|^2 = \Delta_k^2.$$

Portanto, o passo calculado pelo método dogleg é dado por

$$p_k = \begin{cases} p_k^B & , \text{ se } \|p_k^B\| \leq \Delta_k \\ p_k^U + (\tau - 1)(p_k^B - p_k^U) & , \text{ caso contrário,} \end{cases}$$

com

- $p_k^B = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$ .
- $p_k^U = -\frac{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}{\nabla f(x_k)^T B_k \nabla f(x_k)} \nabla f(x_k)$ .
- $\tau$  solução de  $\|p_k^U + (\tau - 1)(p_k^B - p_k^U)\|^2 = \Delta_k^2$ .

# Convergência de métodos de regiões de confiança

Como já mencionado anteriormente, para obter convergência global do método de regiões de confiança, é necessário que a redução do modelo quadrático obtida pela solução aproximada de (2) seja pelo menos uma fração da redução obtida pelo ponto de Cauchy.

Agora estimaremos o decréscimo do modelo quadrático obtido pelo ponto de Cauchy e veremos que, se uma solução aproximada de (2) obtém uma fração do decréscimo do modelo quadrático obtido pelo ponto de Cauchy, então a seqüência de gradientes  $\{\nabla f_k\}$  gerada pelo método de regiões de confiança tem um ponto de acumulação em 0 ou converge para 0, dependendo da escolha de  $\eta = 0$  ou  $\eta$  estritamente positivo.

Primeiramente, vejamos que tanto o ponto de Cauchy como o passo calculado pelo método dogleg satisfazem a equação

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \|\nabla f_k\| \min \left( \Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|} \right), \quad (5)$$

para  $c_1 \in (0, 1]$ .

**Teorema 1:** *O ponto de Cauchy  $p_k^C$  satisfaz*

$$m_k(0) - m_k(p_k^C) \geq \frac{1}{2} \|\nabla f_k\| \min \left( \Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|} \right).$$

# Convergência de métodos de regiões de confiança

Para **satisfazer a equação (5)** é necessário apenas que a solução aproximada  $p_k$  obtenha pelo menos uma fração  $c_2$  da redução obtida pelo ponto de Cauchy.

**Teorema 2:** *Seja  $p_k$  um vetor tal que  $\|p_k\| \leq \Delta_k$  e  $m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2(m_k(0) - m_k(p_k^C))$ . Então  $p_k$  satisfaz (5) com  $c_1 = c_2/2$ . Em particular, se  $p_k$  é a solução exata  $p_k^*$  de (2), então  $p_k$  satisfaz (5) com  $c_1 = \frac{1}{2}$ .*

Note que o **método dogleg** satisfaz (5) com  $c_1 = 1/2$ , já que o passo  $p_k$  é tal que  $m_k(p_k) \leq m_k(p_k^C)$ .

# Convergência de métodos de regiões de confiança

Resultados de convergência global de métodos de regiões de confiança apresentam dois resultados: um para o caso de  $\eta = 0$  e outro para o caso em que  $\eta$  é um escalar pequeno estritamente positivo.

Quando  $\eta = 0$  pede-se que o passo produza apenas decréscimo simples da função objetivo para que seja aceito. Neste caso, vamos mostrar que a seqüência de gradientes  $\{\nabla f_k\}$  tem um ponto limite em 0.

Quando  $\eta$  é estritamente positivo, o passo só é aceito se obtém um decréscimo da função objetivo de pelo menos uma fração do decréscimo obtido no modelo quadrático. Neste caso, veremos que a seqüência de gradientes converge para 0.

**Teorema 3:** Tome  $\eta = 0$  no método de regiões de confiança. Suponha que  $\|B_k\| \leq \beta$  para alguma constante  $\beta$ ,  $f$  possui primeira derivada contínua e limitada inferiormente no conjunto  $\{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$  e todas as soluções aproximadas de (2) satisfazem a desigualdade (5) e  $\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k$ ,  $\gamma \geq 1$ , para constantes positivas  $c_1$  e  $\gamma$ . Vale que

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0.$$

**Teorema 4:** Tome  $\eta \in (0, 1/4)$  no método de regiões de confiança. Suponha que  $\|B_k\| \leq \beta$  para alguma constante  $\beta$ ,  $f$  possui primeira derivada Lipschitz contínua e limitada inferiormente no conjunto  $\{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$  e todas as soluções aproximadas de (2) satisfazem a desigualdade (5) e  $\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k$ ,  $\gamma \geq 1$ , para constantes positivas  $c_1$  e  $\gamma$ . Vale que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f_k = 0.$$