UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS-UFAM
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS - ICE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

UM MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO PROXIMAL INEXATO PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

CLAUDEILSIO DO NASCIMENTO CARVALHO

Manaus-AM
2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS-UFAM
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS - ICE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA

Claudeilsio do Nascimento Carvalho

UM MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO PROXIMAL INEXATO PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Amazonas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática, na área de concentração em Otimização.

Orientador: Roberto Cristóvão Mesquita Silva.

Manaus-AM
2018

Claudeilsio do Nascimento Carvalho

UM MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO PROXIMAL INEXATO PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Amazonas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática, na área de concentração em Otimização.

Manaus, 15 de maio de 2018.

Banca Examinadora:

Prof. Dr º.: Roberto Cristóvão Mesquita Silva
Roberto Cristóvão Mesquita Silva (Orientador)-UFAM.

Prof. Dr ª.:
Flávia Morgana de Oliveira Jacinto (Membro)-UFAM.

Prof. Dr º.: João Carlos de Oliveira Sz
João Carlos de Oliveira Souza (Membro)-UFPI.

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

C331u

Carvalho, Claudeilsio do Nascimento
Um método de regularização proximal inexato para otimização irrestrita / Claudeilsio do Nascimento Carvalho. 2018
56 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Roberto Cristóvão Mesquita Silva
Dissertação (Mestrado em Matemática Pura e Aplicada) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Método de Newton regularizado. 2. Busca de Armijo. 3. Ponto proximal. 4. Otimização irrestrita. I. Silva, Roberto Cristóvão Mesquita II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

Dedico este trabalho aos meus pais Cláudio e Luziele que, com sua grandiosa e admirável simplicidade, ensinaram-me que para alcançar os objetivos não basta apenas ter virtudes, e sim fé, persistir, e sobretudo, aprender com os erros e falhas.

Agradecimentos

Ao concluir esta etapa de minha vida acadêmica, agradeço a todos que, de diversos modos, colaboraram para que este trabalho se concretizasse.

Primeiramente, a Deus que é a razão do meu viver e o qual é fonte de toda a sabedoria.

Ao meu orientador neste trabalho Professor Roberto Cristóvão, o qual contribuiu decisivamente com minha aprendizagem no decorrer do curso e finalização desta dissertação.

A todos aqueles que foram meus professores no decorrer do curso, que compartilharam seus imprescindíveis conhecimentos, contribuindo para meu desenvolvimento e avanço intelectual.

Aos professores do ISB-Coari (Instituto de Saúde e Biotecnologia-Coari): Ademar Vieira, Eduardo Bruno, Ricardo Souza e Fábio Júnior, que sempre me incentivaram nos estudos e me concederam a base pra chegar até aqui.

Aos funcionários da UFAM (Universidade Federal do Amazonas) que se dedicam a manter o zelo e o compromisso da referida instituição, tornando o ambiente acadêmico propício para o processo de ensino-aprendizagem, desse modo colaborando com meu aprendizado.

A CAPES-FAPEAM (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas), pelo apoio financeiro que foi fundamental para se concretizar esta importante etapa de estudos.

E por fim, agradeço a todos que participaram direta e indiretamente desta conquista deixando suas contribuições para realização e finalização deste trabalho.

Resumo

UM MÉTODO DE REGULARIZAÇÃO PROXIMAL INEXATO PARA OTIMIZAÇÃO IRRESTRITA

Neste trabalho, estudamos um algoritmo regularizado para resolver problemas de otimização sem restrições quando a função objetivo é duas vezes diferenciável. O algoritmo foi proposto em [1] e, basicamente é um método Newtoniano apropriado para resolver problemas quando a matriz Hessiana é singular em uma solução ótima local. Este algoritmo é constituído por dois algoritmos os quais nomeamos Algoritmo 1 e Algoritmo 2 e estão ligados diretamente com o algoritmo de Ponto Proximal. Apresentamos uma prova detalhada da convergência global sob hipóteses de que f é duas vezes diferenciável e limitada inferiormente. Também destacamos a convergência local do algoritmo com taxa super-linear com uma condição de margem de erro local no gradiente de f. Por fim, elaboramos exemplos que permitem vislumbrar o funcionamento do algoritmo.

Palavras-chaves: Método de Newton regularizado, Busca de Armijo, Ponto Proximal e Otimização irrestrita.

Abstract

AN INEXACT PROXIMAL REGULARIZATION METHOD FOR UNCONSTRAINED OPTIMIZATION

In this work, we study a regularized algorithm to solve optimization problems without restrictions when the objective function is two-fold differentiable. The algorithm was proposed in [1] and it is basically a Newtonian method appropriated to solve problems when the Hessian matrix is singular in an optimal local solution. This algorithm consists of two sub algorithms, named Algorithm 1 and Algorithm 2 and they are directly connected with the Proximal Point algorithm.We present a detailed proof of global convergence under the assumption that f is two-fold differentiable and lower bounded. We also highlight local convergence of the algorithm with super-linear rate with a local error margin condition in the gradient of f. Finnaly, we elaborate examples that allows one to glimpse the operation of the algorithm.

Keywords: Regularized Newton method, Search of Armijo, Proximal Point and Unconstrained optimization.

Sumário

Notações

A seguir, listamos algumas notações utilizadas neste trabalho.

$\langle x, y \rangle$ - denota o produto interno euclideano entre $x \in \mathbb{R}^n$ e $y \in \mathbb{R}^n$;

$\|x\|$ - denota a norma euclideana de $x \in \mathbb{R}^n$, isto é, $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$;

$S^{m-1} = \{x \in \mathbb{R}^m : \|x\| = 1\}$- denota a esfera unitária de dimensão $m - 1$;

$\nabla^2 f(x)$ - denota a matriz Hessiana da função f no ponto x;

I - denota a matriz identidade de dimensão $n \times n$;

$\|M\| = \max\{\|Mx\| : \|x\| \leq 1\}$ - denota a norma da matriz M de dimensão $n \times n$;

$\lambda_{\min}(M)$ - denota o menor autovalor da matriz M;

$\det(M)$ - denota o determinante da matriz M.

Introdução

Introduzido em [5] e [16,17] por volta da década de 70, o Algoritmo de Ponto Proximal é útil para resolver problemas de otimização irrestrita da forma

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \tag{1}$$

O procedimento deste algoritmo consiste em resolver o problema (1) por intermédio de uma sequência de subproblemas os quais depende da função f dada em (1) e de um certo parâmetro.

O Método do Ponto Proximal (MPP) surgiu devido a problemas ditos mal-postos. Dado um problema da forma

$$L(f) = 0, \tag{2}$$

onde f é um elemento de um conjunto X(usualmente X é um espaço de funções) e $L : X \to X$ é um operador diferenciável (ou integro-diferencial). O problema (2) é dito mal-posto se não tem solução ou tem mais que uma solução ou tem uma única solução, mas esta solução não depende de forma contínua de algum parâmetro do operador L. Se o problema (2) não é mal-posto dizemos que é bem-posto.

A ideia de regularização de um problema está conectada com problemas mal-postos. Esta ideia consiste em substituir o operador L por um operador $L + \theta M$ com $\theta \in \mathbb{R}$ e $M : X \to X$ um operador tal que o problema

$$(L + \theta M)(f) = L(f) + \theta M(f) = 0, \tag{3}$$

seja bem-posto, para qualquer $\theta > 0$. A solução f do problema (3) passa a depender de θ, desse modo para cada θ existe um única solução f_θ e espera-se que, a medida que θ se aproxima de 0, f_θ aproxime-se de uma solução do problema (2). O procedimento de alterar um problema mal-posto para um bem-posto é dito regularização. Portanto, regularizar um problema consiste em provocar uma certa pertubação no operador L de modo que tenhamos um problema bem-posto com solução se aproximando do problema original.

O conceito de regularização, pode ser adaptado aos problemas de otimização se considerarmos $X = \mathbb{R}^n$ e $L = \nabla f$, onde $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é uma função de classe C^1 e convexa. Para tal situação (2) torna-se

$$\nabla f(x) = 0. \tag{4}$$

E, com as hipótese impostas sobre f, resolver (4) é equivalente a solucionar o problema (1). Além disso, supondo que f é limitada inferiormente, se considerarmos uma função $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ estritamente convexa e admitirmos também que g é coerciva, isto é,

$\lim_{\|x\|\to\infty} g(x) = +\infty$, mesmo que o problema (1) não tenha solução, estas condições são suficientes para garantir existência e unicidade do problema regularizado

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) + \theta g(x), \text{ com } \theta > 0. \tag{5}$$

Para uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ de classe C^1, com f limitada inferiormente e convexa, escolhendo um ponto $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e $\overline{\theta} > 0$ pode-se utilizar o MPP que consiste em resolver os subproblemas

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \varphi_k(x) = f(x) + \frac{\theta_k}{2}\|x - x_k\|^2, \tag{6}$$

onde θ_k é um parâmetro de regularização satisfazendo $0 < \theta_k \leq \overline{\theta}$. Um estudo mais elaborado bem como a convergência deste método pode ser visto em [17] e ([8], p. 2-6).

Estudamos teoricamente um algoritmo que foi proposto em [1] para resolver problemas de otimização sem restrições da forma (1) quando a função objetivo é duas vezes diferenciável. O algoritmo proposto será descrito no capítulo 2, o mesmo pertence a classe de métodos de Newton regularizados. Diversos algoritmos já foram propostos para resolver (1), seja na otimização convexa (um exemplo [7]) ou na otimização não convexa (por exemplo, [18], [19], [20]). O processo comum desses algoritmos é executar uma ou várias etapas de minimização em um problema regularizado (6), onde x_k é o iterado na iteração k e $\theta_k > 0$ é um parâmetro de regularização. No presente trabalho, estamos interessados na propriedade de regularização e em apresentar mais um algoritmo para minimizar funções não-lineares duas vezes diferenciáveis.

Basicamente, o algoritmo é um método newtoniano aplicado a condições de otimalidade de primeira ordem para (6), enquanto atualiza o valor do parâmetro de regularização ao longo das iterações. O método em estudo é composto por dois algoritmos que serão denominados Algoritmo 1 e Algoritmo 2. No Algoritmo 1, o valor do parâmetro θ_k é atualizado e em seguida deve-se determinar x_k^+ resolvendo o seguinte sistema:

$$(H_k + \theta_k I)(x_k^+ - x_k) = -\nabla f(x_k), \tag{7}$$

onde x_k é o iterado atual, H_k é a Hessiana de f em x_k, ou uma aproximação para isso, e x_k^+ indica uma iteração de teste. Um controle sobre os valores de $\varphi_k(x_k^+)$ e $\|\nabla\varphi_k(x_k^+)\|$ permite decidir se x_k^+ é, ou não é, aceito como novo iterado x_{k+1}. Se não é o caso, o algoritmo 2 é chamado para se obter uma redução suficiente do valor da função φ_k e da norma de seu gradiente. O sistema Algoritmo 1-Algoritmo 2, já foi usado no quadro da otimização restrita ([2], [3], [4]) e mostrou-se eficaz quando o sistema de otimização depende de alguns parâmetros.

Nosso trabalho encontra-se organizado do seguinte modo:

No Capítulo 1 temos as preliminares, que é constituída por resultados teóricos de Otimização e Análise, os quais fornecem a sustentabilidade do algoritmo proposto.

A descrição, análise de convergência global e local do algoritmo são feitas no Capítulo 2. É mostrado que o algoritmo proposto é globalmente convergente apenas com as hipóteses de que a função f é duas vezes diferenciável e limitada inferiormente. Para mostrarmos a convergência local necessitamos de hipóteses adicionais. Está provado que o algoritmo é super-linearmente convergente sob uma hipótese de erro local no gradiente de f.

Ilustrações numéricas do algoritmo são feitas no Capítulo 3. Finalmente, no Capítulo 4, destacamos as considerações finais e pesquisas futuras.

Capítulo 1

Preliminares

Para uma melhor compreensão desta dissertação, designamos este capítulo a resultados e definições. Fazemos uma breve abordagem sobre: sequências, aplicações diferenciáveis, matriz, existências de soluções de um problema de otimização, condições de otimalidade para problemas irrestrito, método de descida, busca de Armijo e por fim método de Newton. Em alguns momentos provamos resultados e, quando for omitido a demonstração indicamos onde encontrar.

1.1 Sequências no espaço euclidiano

Esta seção é constituída por algumas propriedades que serão úteis em determinados momentos de nossa dissertação e, tais propriedades são baseadas em [11] e [13].

Definição 1.1.1. *Uma sequência em $\mathbb{R}^n$ é uma aplicação $x : \mathbb{N} \to \mathbb{R}^n$, definida no conjunto $\mathbb{N}$ dos números naturais. O valor que essa aplicação assume no número k é indicado por x_k e chama-se o k-ésimo termo da sequência. Usaremos a notação $\{x_k\}$ para indicar a sequência cujo k-ésimo termo é $x_k \in \mathbb{R}^n$.*

Definição 1.1.2. *Uma subsequência de x_k é a restrição da sequência a um subconjunto infinito $\mathbb{N}' = \{k_1 < k_2 < ... < k_i < ...\} \subset \mathbb{N}$. A subsequência será indicada pela notação $\{x_{k_j}\}$, $j \in \mathbb{N}$.*

Dizemos que a sequência $\{x_k\}$ é limitada quando o conjunto de seus termos é limitado em $\mathbb{R}^n$, ou seja, quando existe um número real $c > 0$ tal que $\|x_k\| \leq c$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Definição 1.1.3. *Um ponto $a \in \mathbb{R}^n$ é chamado limite da sequência de pontos $x_k \in \mathbb{R}^n$ quando , $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = a$.*

Pela definição acima tem-se que $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = a$ se, e somente se $\lim\limits_{k\to\infty} \|x_k - a\| = 0$.

Proposição 1.1.1. *Seja $\sigma \in (0,1)$. Então para todo $j \in \mathbb{N}$ temos*

$$\frac{(1+\sigma)^j - 1}{\sigma} = 1 + (1+\sigma) + (1+\sigma)^2 + \ldots + (1+\sigma)^{j-1}.$$

Demonstração. Provaremos por indução em $j \in \mathbb{N}$.

Para $j = 1$ temos, $\dfrac{(1+\sigma)^1 - 1}{\sigma} = \dfrac{\sigma}{\sigma} = 1.$

Para $j = 2$ temos, $\dfrac{(1+\sigma)^2 - 1}{\sigma} = \dfrac{1 + 2\sigma + \sigma^2 - 1}{\sigma} = 2 + \sigma = 1 + (1+\sigma)$.
Suponha que a igualdade vale para $j = p \in \mathbb{N}$, isto é,

$$\frac{(1+\sigma)^p - 1}{\sigma} = 1 + (1+\sigma) + (1+\sigma)^2 + \ldots + (1+\sigma)^{p-1}.$$

Provaremos para $j = p+1 \in \mathbb{N}$. Usando a hipótese de indução temos que,

$$\begin{aligned}
\frac{(1+\sigma)^{p+1} - 1}{\sigma} &= \frac{(1+\sigma)^p(1+\sigma) - 1}{\sigma} \\
&= \frac{(1+\sigma)^p(1+\sigma)}{\sigma} - \frac{1}{\sigma} \\
&= \frac{(1+\sigma)^p}{\sigma} + (1+\sigma)^p - \frac{1}{\sigma} \\
&= \frac{(1+\sigma)^p - 1}{\sigma} + (1+\sigma)^p \\
&= 1 + (1+\sigma) + (1+\sigma)^2 + \ldots + (1+\sigma)^{p-1} + (1+\sigma)^p.
\end{aligned}$$

□

Proposição 1.1.2. *Considere $a \in \mathbb{R}$, com $a \in (0,1)$. Seja*

$$x_j = \frac{1 - a^{j+1}}{1-a} = 1 + a + a^2 + \ldots + a^j,$$

para todo $j \in \mathbb{N}$. A sequência $(x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots)$ é crescente e limitada. Em particular se $a = \dfrac{1}{2}$ tem-se

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{1}{2^j} = 1 + \frac{1}{2} + \ldots + \frac{1}{2^k} < 2.$$

Demonstração. Temos

$$\begin{aligned}
x_{j+1} &= \frac{1 - a^{j+2}}{1-a} \\
&= \frac{(1-a)(1 + a^2 + a^3 + \ldots + a^j + a^{j+1})}{1-a} \\
&= 1 + a^2 + a^3 + \ldots + a^j + a^{j+1} = x_j + a^{j+1},
\end{aligned}$$

isto mostra que a sequência $(x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots)$ é crescente. Agora tem-se que

$$0 < x_j = \frac{1 - a^{j+1}}{1-a} = \frac{1}{1-a} - \frac{a^{j+1}}{1-a} < \frac{1}{1-a},$$

para todo $j \in \mathbb{N}$ daí, segue que a sequência $(x_1, x_2, \ldots, x_j, \ldots)$ é limitada. Por fim, para $a = \frac{1}{2}$ temos

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{1}{2^j} = 1 + \frac{1}{2} + \ldots + \frac{1}{2^n} = \frac{1 - (\frac{1}{2})^{j+1}}{1 - \frac{1}{2}} = \frac{1}{\frac{1}{2}} - \frac{\frac{1}{2^{j+1}}}{\frac{1}{2}} = 2 - \left(\frac{1}{2}\right)^{j+1-1} = 2 - \frac{1}{2^j} < 2,$$

logo,

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{1}{2^j} < 2. \tag{1.1}$$

$\square$

Observação 1.1.1. *Sejam p e q dois inteiros não negativos. Considere as seguintes somas,*

$$\sum_{k=0}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \ldots + \frac{1}{2^{p-1}} + \frac{1}{2^p} + \frac{1}{2^{p+1}} + \ldots + \frac{1}{2^{p+q-1}},$$

e

$$\sum_{k=0}^{p-1} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \ldots + \frac{1}{2^{p-1}}.$$

Temos que,

$$\sum_{k=0}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} = \frac{1-(\frac{1}{2})^{p+q}}{1-\frac{1}{2}} = \frac{\frac{2^{p+q}-1}{2^{p+q}}}{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2^{p+q}-1}{2^{p+q}}\right)2 = (2^{p+q}-1)2^{1-p-q},$$

e de modo análogo temos,

$$\sum_{j=0}^{p-1} \frac{1}{2^k} = \frac{1-(\frac{1}{2})^{p}}{1-\frac{1}{2}} = \frac{\frac{2^{p}-1}{2^{p}}}{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2^{p}-1}{2^{p}}\right)2 = (2^{p}-1)2^{1-p}.$$

Então,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=p}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} &= \sum_{k=0}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} - \sum_{k=0}^{p-1} \frac{1}{2^k} \\
&= (2^{p+q}-1)2^{1-p-q} - (2^p-1)2^{1-p} \\
&= (2^{p+q}-1)2^{1-p}2^{-q} - (2^p-1)2^{1-p} \\
&= 2^{1-p}(2^{p+q-q} - 2^{-q} - 2^p + 1) \\
&= 2^{1-p}(1-2^{-q}) \\
&= 2^{1-p} - 2^{1-p-q} \\
&< 2^{1-p} \\
&= \frac{1}{2^{p-1}},
\end{aligned}$$

portanto,

$$\sum_{k=p}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} < \frac{1}{2^{p-1}}. \tag{1.2}$$

Sejam (a_n) uma sequência de números reais. A partir desta sequência, formamos uma nova sequência (s_n) cujos elementos são as somas

$$s_1 = a_1, s_2 = a_1 + a_2, \ldots, s_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n,$$

que chama-se as *reduzidas* da série $\sum a_n$. A parcela a_n é chamada o n-ésimo ou o termo geral da série.

Quando existe o limite

$$s = \lim s_n = \lim_{n \to \infty} (a_1 + a_2 + \ldots + a_n),$$

dizemos que a série $\sum a_n$ é convergente e o limite s será chamado a *soma* da série. Deste modo escrevemos

$$s = \sum a_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n + \ldots \quad .$$

Se a sequência das reduzidas não convergir, dizemos que a série $\sum a_n$ é divergente. Ás vezes é conveniente considerar séries do tipo $\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n$.

A respeito de séries exitem vários resultados, mas aqui destacamos os seguintes.

Teorema 1.1.1. ([11], *p.135*) *Se* $\sum a_n$ *é uma série convergente então* $\lim a_n = 0$.

Teorema 1.1.2. ([11], *p.137*) *Seja* $a_n \geq 0$ *para todo* $n \in \mathbb{N}$. *A série* $\sum a_n$ *converge se, e somente se, as reduzidas* $s_n = a_1 + a_2 + \ldots + a_n$ *formam uma sequência limitada, isto é, se, e somente se existe* $k > 0$ *tal que* $a_1 + \ldots + a_n < k$ *para todo* $n \in \mathbb{N}$.

1.2 Aplicações Diferenciáveis

Nesta seção destacamos alguns resultados a respeito de aplicações diferenciáveis, os quais serão importantes para o prosseguimento deste trabalho. Para um estudo mais detalhado dos conceitos e resultados exibidos aqui, recomendamos principalmente [13] e [14].

Considere um conjunto $U \subset \mathbb{R}^n$ aberto. Diz-se que uma aplicação $f : U \to \mathbb{R}$ é diferenciável em um ponto $a \in U$ quando existe, na vizinhança de a, uma "boa aproximação linear" para f. Para ser mais preciso tem-se a

Definição 1.2.1. *Seja* $U \subset \mathbb{R}^n$ *um conjunto aberto. Diz-se que a aplicação* $f : U \to \mathbb{R}^n$ *é diferenciável em um ponto* $a \in U$ *se existe uma transformação linear* $T : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ *tal que*

$$f(a + v) - f(a) = T.v + r(v), \quad \text{onde} \quad \lim_{v \to 0} \frac{r(v)}{\|v\|} = 0.$$

Na definição 1.2.1, v deve ser suficientemente pequeno para que $a + v \in U$ e portanto $f(a + v)$ tenha sentido. Sendo U aberto, existe $\eta > 0$ tal que $\|v\| < \eta$ implica $a + v \in U$.

Definição 1.2.2. *Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função definida no conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Para cada $i = 1, ..., n$ a i-ésima derivada parcial da função f em um ponto $a = (a_1, \ldots, a_n) \in U$ é dada pelo número*

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = \lim_{t \to 0} \frac{f(a + te_i) - f(a)}{t},$$

caso este limite exista. Onde e_i é o i-ésimo vetor da base canônica do $\mathbb{R}^n$.

Definição 1.2.3. *Seja $f : U \to \mathbb{R}$ uma função definida no conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. O gradiente de uma função diferenciável $f : U \to \mathbb{R}$ no ponto $a \in U$ é o vetor*

$$\nabla f(a) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}(a), \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}(a) \right).$$

Definição 1.2.4. *Seja $v \in \mathbb{R}^n$ um vetor qualquer e $U \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto. A derivada direcional da função $f : U \to \mathbb{R}$, no ponto a na direção de v, é por definição*

$$\frac{\partial}{\partial v}(a) = \lim_{t \to 0} \frac{f(a + tv) - f(a)}{t}.$$

Definição 1.2.5. *Seja $U \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto. Dizemos que uma aplicação $f : U \to \mathbb{R}^n$ é continuamente diferenciável, ou que f é de classe C^1 e escrevemos $f \in C^1$, quando f for diferenciável e, além disso, $f' : U \to \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ for contínua.*

De mesma forma, se $f' : U \to \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ tem derivada no ponto $x \in U$, dizemos que f é *duas vezes diferenciável* no ponto x e escrevemos $f'' : \mathbb{R}^m \to \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n)$ para indicar a derivada de f' no ponto x, ou seja, a segunda derivada de f em x. Desse modo, $f''(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n))$. Se f é duas vezes diferenciável em todos os pontos $x \in U$, dizemos que f é duas vezes diferenciável em U. Se além disso, aplicação $f'' : \mathbb{R}^m \to \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^n))$ for contínua, diremos que f é *duas vezes continuamente diferenciável* em U e escrevemos $f \in C^2$. Podemos dizer que f é de classe C^2.

De modo mais geral, diz-se que f é uma aplicação de classe C^k, ou k vezes continuamente diferenciável, e escrevemos $f \in C^k$, quando f^k for contínua.

Teorema 1.2.1. ([13], *Regra da Cadeia, p. 103*) *Sejam $U \subset \mathbb{R}^m, V \subset \mathbb{R}^n$ abertos e $f : U \to \mathbb{R}^n, g : V \to \mathbb{R}^p$ diferenciáveis nos pontos $a \in U, b = f(a) \in V$, com $f(U) \subset V$. Então $g \circ f : U \to \mathbb{R}^p$ é diferenciável no ponto a e*

$$(g \circ f)'(a) = g'(b).f'(a) : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^p.$$

Teorema 1.2.2. ([13], *Desigualdade do Valor Médio para Caminhos, p.44*) *Seja $f : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ um caminho,diferenciável no intervalo aberto (a,b), se existe $M > 0$ tal que $\|f'(t)\| \leq M$ para todo $t \in (a, b)$ então*

$$\|f(b) - f(a)\| \leq M(b - a).$$

Teorema 1.2.3. *(Desigualdade do Valor Médio) Considere $U \subset \mathbb{R}^m$ aberto e, seja $f : U \to \mathbb{R}^n$ diferenciável em todos os pontos do segmento de reta $[a, a + v] \subset U$. Se para todo $t \in [0, 1]$ existe $M > 0$ tal que $\|f'(a + tv)\| \leq M$ então*

$$\|f(a + v) - f(a)\| \leq M\|v\|.$$

Demonstração. Seja o caminho $\lambda : [0,1] \to \mathbb{R}^n$, definido por $\lambda(t) = f(a+tv)$, como f é diferenciável λ é diferenciável e pela regra da cadeia, $\lambda'(t) = f'(a+tv).v$ para todo $t \in [0,1]$, assim temos

$$\|\lambda'(t)\| = \|f'(a+tv).v\| \leq \|f'(a+tv)\|.\|v\| \leq M\|v\| \quad \text{para todo t} \in [0,1],$$

pelo teorema da Desigualdade do Valor Médio para Caminhos, segue que

$$\|f(a+v) - f(a)\| = \|\lambda(1) - \lambda(0)\| \leq M\|v\|(1-0) = M\|v\|.$$

□

Uma consequência da Desigualdade do Valor Médio é o,

Corolário 1.2.1. *Se $U \subset \mathbb{R}^m$ é aberto e convexo e, existe $M > 0$ tal que a aplicação diferenciável $f : U \to \mathbb{R}^n$ satisfaz $\|f'(x)\| \leq M$ para todo $x \in U$, então*

$$\|f(x) - f(y)\| \leq M\|x - y\| \quad \textit{para quaisquer } x,\ y \in U.$$

Demonstração. Sejam $y, x \in U$ quaisquer, como $U \subset \mathbb{R}^m$ é convexo o segmento de reta $[y,x] \subset U$, isto é, para todo $t \in [0,1]$ temos $(1-t)y + tx = y + t(x-y) \in U$ e assim $\|f'(y + t(x-y))\| \leq M$. Pela Desigualdade do Valor Médio tem-se

$$\|f(x) - f(y)\| = \|f(y + (x-y)) - f(y)\| \leq M\|x - y\|.$$

□

Teorema 1.2.4. ([13], *Schwarz, p.67*). *Se $f : U \to \mathbb{R}$ é de classe C^2 no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$. Então, para quaisquer $1 \leq i, j \leq n$, tem-se*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(c) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(c).$$

O Teorema de Schwarz garante que se $f : U \to \mathbb{R}$ é de classe C^2 no aberto $U \subset \mathbb{R}^n$ a matriz hessiana de f é simétrica.

Teorema 1.2.5. ([15], *Taylor com resto de Lagrange, p.29*) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 e $x, d \in \mathbb{R}^n$. Se f é duas vezes diferenciável no segmento $(x, x+d)$, então existe $t \in (0,1)$ tal que*

$$f(x+d) - f(x) = \langle \nabla f(x), d \rangle + \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x+td)d \rangle.$$

Teorema 1.2.6. ([13], *Teorema Fundamental do Cálculo para Caminhos, p.46*). *Se $f : [a,b] \to \mathbb{R}^n$ é um caminho de classe C^1 então*

$$\int_a^b f'(t)dt = f(b) - f(a).$$

Corolário 1.2.2. *Seja $U \subset \mathbb{R}^m$ um conjunto aberto. Dada $f : U \to \mathbb{R}^n$ de classe C^1, suponha que o segmento de reta $[x, x+v]$ esteja contido em U. Então*

$$f(x+v) - f(x) = \int_0^1 f'(x+tv)v\ dt.$$

Demonstração. Defina o caminho $\psi : [0,1] \to \mathbb{R}^n$, dado por $\psi(t) = f(x+tv)$. Como f é de classe C^1 ψ é de classe C^1 com $\psi(0) = f(x), \psi(1) = f(x+v)$ e, pelo teorema 1.2.1 temos $\psi'(t) = f'(x+tv)v$. Então pelo teorema fundamental do cálculo para caminhos

$$f(x+v) - f(x) = \psi(1) - \psi(0) = \int_0^1 \psi'(t) = \int_0^1 f'(x+tv)v.$$

□

Teorema 1.2.7. ([14], *Fórmula de Taylor com resto integral, p.75*) *Seja $f : U \to \mathbb{R}^n$ uma aplicação de classe C^{s+1}. Se o segmento de reta $[x, x+v]$ está contido no aberto U, então*

$$f(x+v) = f(x) + f'(x).v + \frac{1}{2}f''(x).v^2 + ... + \frac{1}{s!}f^{(s)}(x)v^{(s)} + r(v),$$

onde

$$r(v) = \int_0^1 \frac{(1-t)^s}{s!} f^{(s+1)}(x+tv).v^{(s+1)}dt.$$

1.3 Matrizes e aplicações lineares

Os resultados apresentados nesta seção, assim como nas anteriores serão de fundamental importância para o desenvolvimento deste trabalho. Estaremos enfatizando algumas propriedades de sobre aplicações lineares.

Definição 1.3.1. *Um escalar λ é denominado um autovalor de uma Matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, se existe $v \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}$, tal que*

$$Av = \lambda v.$$

Note que a igualdade acima pode ser escrita sendo

$$(A - \lambda I)v = \vec{0},$$

como $v \neq \vec{0}$, segue que a matriz $(A - \lambda I)$ não é invertível (isto é, singular). Consequentemente, qualquer autovalor λ de A satisfaz

$$\det(A - \lambda I) = 0. \tag{1.3}$$

A equação (1.3) gera um polinômio de grau n em λ, e tal polinômio é chamado de polinômio característico da matriz A. Portanto os autovalores são determinados ao calcular o polinômio característico e as raízes deste mesmo polinômio.

Em geral os autovalores de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ podem ser reais ou complexos, pois um polinômio com coeficientes reais pode possui raízes complexas, porém se A for uma matriz simétrica seus autovalores são reais.

Corolário 1.3.1. ([19], *p.39*) *Suponha que a matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ seja singular, então $\|A - I\| \geq 1$.*

Proposição 1.3.1. *Se a aplicação linear $A : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ é injetiva então existe $c > 0$ tal que $\|A(x)\| \geq c\|x\| \quad \forall\, x \in \mathbb{R}^m$.*

Demonstração. Se x é o vetor nulo em $\mathbb{R}^m$, o resultado vale imediatamente, pois $\|A(x)\| = \|A(\vec{0})\| = \|0\| = c\|\vec{0}\|$. Agora considere $x \in \mathbb{R}^m \backslash \{\vec{0}\}$ e suponha que $\forall\ c > 0$ existe $x \in \mathbb{R}^m$ tal que $\|A(x)\| < c\|x\|$. Então para $x_1, x_2, ..., x_k \in \mathbb{R}^m \backslash \{\vec{0}\}$, temos $\|A(x_1)\| < \|x_1\|, \|A(x_2)\| < \dfrac{\|x_2\|}{2}, ..., \|A(x_k)\| < \dfrac{\|x_k\|}{k}$. Daí

$$\left\| A\left(\frac{x_k}{\|x_k\|} \right) \right\| < \frac{1}{k}. \tag{1.4}$$

A sequência $\left\{ \dfrac{x_k}{\|x_k\|} \right\} \subset S^{m-1}$, pois $\left\| \dfrac{x_k}{\|x_k\|} \right\| = \dfrac{\|x_k\|}{\|x_k\|} = 1$. E como S^{m-1} é compacta existe uma subsequência $\left\{ \dfrac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} \right\}$ de $\left\{ \dfrac{x_k}{\|x_k\|} \right\}$ tal que $\displaystyle\lim_{k_j \to \infty} \frac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} = \overline{x} \in S^{m-1}$ e, como A é contínua temos, $\displaystyle\lim_{k_j \to \infty} A\left(\frac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} \right) = A(\overline{x})$. Por outro lado usando a continuidade da norma e (1.4) temos que $\displaystyle\lim_{k_j \to \infty} \left\| A\left(\frac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} \right) \right\| = \left\| \lim_{k_j \to \infty} A\left(\frac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} \right) \right\| = 0$, logo, $\displaystyle\lim_{k_j \to \infty} A\left(\frac{x_{k_j}}{\|x_{k_j}\|} \right) = \vec{0}$, segue da unicidade do limite que $A(\overline{x}) = \vec{0}$ e como A é injetiva temos que, $\overline{x} = \vec{0}$ o que é um absurdo pois $\overline{x} \in S^{m-1}$. Portanto o resultado é verdadeiro. □

Proposição 1.3.2. *Se a aplicação linear $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ é invertível, então existe $c > 0$ tal que $\|A(x)\| \geq c\|x\| \quad \forall\ x \in \mathbb{R}^m$. Além disso $\|A^{-1}\| \leq \dfrac{1}{c}$.*

Demonstração. Como A é injetiva pela proposição 1.3.1 existe $c > 0$ tal que $\|A(x)\| \geq c\|x\| \quad \forall\ x \in \mathbb{R}^m$. Como A é sobrejetiva dado $y \in \mathbb{R}^n$ existe $z \in \mathbb{R}^n$ tal que $A(z) = y$, e sendo A é invertível temos $z = A^{-1}(y)$. Assim de $\|A(z)\| \geq c\|z\|$, temos

$$c\|A^{-1}(y)\| \leq \|AA^{-1}(y)\| = \|y\|,$$

o que nos dá $\|A^{-1}(y)\| \leq \dfrac{1}{c}\|y\|$, e portanto

$$\|A^{-1}\| = \max\{\|A^{-1}(y)\| : \|y\| \leq 1\} \leq \frac{1}{c}.$$

□

Proposição 1.3.3. *Seja v um autovetor de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com λ o autovalor associado a v. Então para todo $c \in \mathbb{R}$, v é um autovetor da matriz $A - cI$ e os autovalores associados a v são da forma $\lambda - c$, onde c é autovalor da matriz I associado a v. Além disso se A é semi-definida positiva e $c < 0$ temos que*

$$\|(A - cI)^{-1}\| \leq -\frac{1}{c}.$$

Demonstração. De fato, para $v \neq \vec{0}$ temos que $Av = \lambda v$. Seja $c \in \mathbb{R}$ qualquer, assim

$$(A - cI)v = Av - cv = \lambda v - cv = (\lambda - c)v,$$

e isso prova que o vetor v correspondente a λ autovalor de A é um autovetor associado a $\lambda - c$ para $A - cI$. Se A é semi-definida positiva e $c < 0$ a matriz $A - cI$ é definida positiva, portanto invertível e, ainda $\lambda - c > 0$. Então temos

$$\|(A - cI)v\| = \|(\lambda - c)v\| = |\lambda - c|\|v\| = (\lambda - c)\|v\| \geq -c\|v\|,$$

pela proposição 1.3.2 tem-se que

$$\|(A - cI)^{-1}\| \leq -\frac{1}{c},$$

finalizando a prova. □

1.4 Existências de soluções

Nesta seção apontamos alguns resultados que asseguram a existência de soluções para um problema de otimização irrestrita.

Considere um conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ e uma função $f : \Omega \to \mathbb{R}$. Estamos interessados em determinar (se existir) uma solução de um problema da forma

$$\min_{x \in \Omega} f(x), \tag{1.5}$$

onde f é chamada função objetivo, Ω é denominado conjunto viável e, os elementos de Ω são conhecidos como pontos viáveis. Quando $\Omega = \mathbb{R}^n$, dizemos que o problema (1.5) é *irrestrito* e, se $\Omega \neq \mathbb{R}^n$ dizemos que é *restrito.*

Definição 1.4.1. *Seja $\overline{x} \in \Omega$. Dizemos que $\overline{x}$ é*

(a) minimizador global de (1.5)*, se*

$$f(\overline{x}) \leq f(x), \ \textit{para todo } x \in \Omega. \tag{1.6}$$

(b) minimizador local de (1.5)*, se existe uma vizinhança U de $\overline{x}$ tal que*

$$f(\overline{x}) \leq f(x), \ \textit{para todo } x \in \Omega \cap U. \tag{1.7}$$

O resultado a seguir estabelece uma condição para existência de solução do problema (1.5).

Teorema 1.4.1. ([12], *p.*45)(*Weierstrass*) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função contínua e seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto não vazio e compacto. Então f atinge seu máximo e seu mínimo em Ω, ou seja, existem pontos $x^*, \overline{x} \in \Omega$ tais que $f(x^*) \leq f(x) \leq f(\overline{x})$.*

Como consequência deste teorema temos o,

Corolário 1.4.1. *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função contínua e suponha que existe $c \in \mathbb{R}$ tal que o conjunto $L = \{x \in \mathbb{R}; f(x) \leq c\}$ é não vazio e compacto. Então f tem um minimizador global.*

Demonstração. Como $L = \{x \in \mathbb{R}; f(x) \leq c\}$ é não vazio e compacto, e $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é contínua pelo teorema 1.4.1 existe $\overline{x} \in L$ tal que $f(\overline{x}) \leq f(x)$ para todo $x \in L$. Seja $y \notin L$, temos $f(y) > c > f(\overline{x})$. Assim, $f(\overline{x}) \leq f(x)$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$. □

Existe outro resultado que garante a existência de minimizador global em $\mathbb{R}^n$, sem admitir compacidade. Porém, necessitamos uma hipótese adicional sobre a função f.

Definição 1.4.2. *Uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é dita coerciva quando $\lim\limits_{\|x\| \to \infty} f(x) = +\infty$, isto é, quando para todo $M > 0$ existe $r > 0$ tal que $f(x) > 0$ sempre que $\|x\| > 0$.*

Exemplo 1. *A função $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, dada por $f(x, y) = x^2 + y^2$ é coerciva.*
De fato, temos

$$\lim_{\|(x,y)\| \to \infty} f(x, y) = \lim_{\|(x,y)\| \to \infty} x^2 + y^2 = \lim_{\|(x,y)\| \to \infty} \|(x, y)\|^2 = +\infty.$$

Exemplo 2. *A função $g : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, dada por $g(x, y) = \dfrac{1}{x^2 + y^2 + 1}$ não é coerciva.*
De fato, pois

$$\lim_{\|(x,y)\| \to \infty} g(x, y) = \lim_{\|(x,y)\| \to \infty} \frac{1}{x^2 + y^2 + 1} = \lim_{\|(x,y)\| \to \infty} \frac{1}{\|(x, y)\|^2 + 1} = 0.$$

Teorema 1.4.2. ([15], *p.*37) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função contínua e coerciva. Então, f tem (pelo menos um) minimizador global.*

Prosseguindo, temos a definição da distância de um ponto a um conjunto.

Definição 1.4.3. *Chama-se distância do ponto $a \in \mathbb{R}^n$ ao conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ ao número*

$$d(a; X) = \inf_{x \in X} \|x - a\|.$$

Seja $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ uma aplicação continuamente diferenciável. Considere o sistema de equações não necessariamente linear,

$$F(x) = \vec{0}. \tag{1.8}$$

E suponha que o conjunto solução S do sistema (1.8) seja não vazio.

Definição 1.4.4. ([21], *p.*240) *Seja V um subconjunto do $\mathbb{R}^n$ tal que $S \cap V \neq \emptyset$. Dizemos que $\|F(x)\|$ fornece um erro local em V para o sistema* (1.8) *se existe uma constante $k > 0$ tal que*

$$k\ d(x, S) \leq \|F(x)\|, \text{ para todo } x \in V. \tag{1.9}$$

Exemplo 3. *Considere a aplicação continuamente diferenciável $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ dada por $F(x, y) = (2x, 2y)$. Tome $V = \mathbb{R}^2$, assim resolvendo o sistema $F(x, y) = (0, 0)$ temos que $S = \{(0, 0) \in \mathbb{R}^2\}$, logo $S \cap V \neq \emptyset$. Seja $v = (a, b) \in V$ qualquer, então*

$$d(v, S) = \inf_{x \in S} \|x - v\| = \|v\| = \|(a, b)\| \leq 2\|(a, b)\| = \|F(a, b)\| = \|F(v)\|, \forall\ v \in V.$$

Logo $\|F(v)\|$ fornece um erro local para o sistema $F(x, y) = (0, 0)$ com constante $k = 1$.

Agora, considere um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$, um ponto $y \in \mathbb{R}^n$ e o problema de encontrar um ponto de X mais próximo de y. Este problema pode não ter solução, e quando tem, não se garante unicidade. Porém, o resultado a seguir garante a existência de solução se X for um conjunto fechado não vazio.

Teorema 1.4.3. *Seja $X \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto não vazio e fechado. Para todo $y \in \mathbb{R}^n$, existe $\overline{y} \in X$ tal que*

$$\|y - \overline{y}\| = \inf_{x \in X} \|y - x\|,$$

para todo $x \in X$.

Demonstração. Seja $\alpha = \inf_{x \in X} \|y - x\|$. Então, por definição de ínfimo, para todo $k \in \mathbb{N}$, existe $x_k \in X$ tal que

$$\alpha \leq \|y - x_k\| \leq \alpha + \frac{1}{k}. \tag{1.10}$$

Em particular, $\|y - x_k\| \leq \alpha + 1$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Considere $y \in \mathbb{R}^n$ qualquer e fixo, então

$$\|x_k\| = \|x_k - y + y\| \leq \|x_k - y\| + \|y\| = \|y - x_k\| + \|y\| \leq \alpha + 1 + \|y\| = c,$$

isto significa que a sequência $\{x_k\}$ é limitada. Logo, existe uma subsequência convergente, digamos $x_{k_j} \to \overline{y}$, onde $j \in \mathbb{N}' \subset \mathbb{N}$. Como X é fechado $\overline{y} \in X$. E ainda pela continuidade da norma temos

$$\lim_{k_j \to \infty} \|y - x_{k_j}\| = \| \lim_{k_j \to \infty} (y - x_{k_j})\| = \| \lim_{k_j \to \infty} y - \lim_{k_j \to \infty} x_{k_j}\| = \|y - \overline{y}\|.$$

Mas por (1.10) temos que $\lim_{k_j \to \infty} \|y - x_{k_j}\| = \alpha$. Portanto pela unicidade do limite segue que

$$\|y - \overline{y}\| = \alpha = \inf_{x \in X} \|y - x\|,$$

como queríamos demonstrar. □

1.5 Condições de otimalidade para problemas irrestritos

Aqui enunciamos as condições necessárias e suficientes que caracterizam o minimizador (ou os minimizadores) de um problema sem restrições.

Teorema 1.5.1. (*Condição necessária de 1º ordem*) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciável no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um minimizador local de f, então*

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

Demonstração. Seja $d \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}$ arbitrário. Como x^* é um minimizador local, existe $\delta > 0$ tal que

$$f(x^*) \leq f(x^* + td), \quad \text{para todo} \quad t \in (0, \delta). \tag{1.11}$$

Como f é diferenciável em x^* temos

$$f(x^* + td) - f(x^*) = t\langle \nabla f(x^*), d\rangle + r(t), \quad \text{onde} \lim_{t \to 0} \frac{r(t)}{t} = 0.$$

Por (1.11) temos

$$t\langle \nabla f(x^*), d\rangle + r(t) \geq 0, \quad \text{onde} \lim_{t \to 0} \frac{r(t)}{t} = 0.$$

Dividindo a expressão acima por $t > 0$ e passando ao limite com $t \to 0$, obtemos

$$\langle \nabla f(x^*), d\rangle \geq 0, \quad \text{para todo} \quad d \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}. \tag{1.12}$$

Suponha que $\nabla f(x^*) \neq \vec{0}$. Assim podemos tomar $d = -\nabla f(x^*)$ e, de (1.12) teríamos

$$0 \leq \langle \nabla f(x^*), -\nabla f(x^*)\rangle = -\|\nabla f(x^*)\|^2,$$

o que é uma contradição. Logo $\nabla f(x^*) = \vec{0}$. □

Teorema 1.5.2. (*Condição necessária de 2º ordem*) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um minimizador local de f, então a matriz Hessiana de f no ponto x^* é semi-definida positiva, ou seja,*

$$\langle d, \nabla^2 f(x^*)d\rangle \geq 0, \ \textit{para todo}\ d \in \mathbb{R}^n.$$

Demonstração. Seja $d \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}$ qualquer e fixo, como $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável em $x^* \in \mathbb{R}^n$ vale que

$$f(x^* + td) = f(x^*) + t\langle \nabla f(x^*), d\rangle + \frac{1}{2}t^2\langle \nabla^2 f(x^*)d, d\rangle + r(t), \quad \text{com} \quad \lim_{t\to 0} \frac{r(t)}{t^2} = 0.$$

Sendo x^* um minimizador local de f pelo teorema anterior temos que $\nabla f(x^*) = 0$ e, assim

$$f(x^* + td) - f(x^*) = \frac{1}{2}t^2\langle \nabla^2 f(x^*)d, d\rangle + r(t), \quad \text{com} \quad \lim_{t\to 0} \frac{r(t)}{t^2} = 0.$$

Tomando t suficientemente pequeno temos que

$$0 \leq f(x^* + td) - f(x^*) = \frac{1}{2}t^2\langle \nabla^2 f(x^*)d, d\rangle + r(t),$$

dividindo por t^2 e passando o limite quando $t \to 0$, obtemos

$$\langle d, \nabla^2 f(x^*)d\rangle \geq 0, \ \text{para todo}\ d \in \mathbb{R}^n.$$

□

O resultado a seguir estabelece uma condição para que pontos estacionários (caso existam) de uma função duas vezes diferenciável sejam pontos de mínimo local.

Teorema 1.5.3. ([15], *teorema 2.14,Condição suficiente de 2º ordem, pg.42*) *Seja uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ duas vezes diferenciável no ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$. Se x^* é um ponto estacionário da função f e $\nabla^2 f(x^*)$ é definida positiva, então x^* é minimizador local estrito de f.*

1.6 Métodos de descida e Busca de Armijo

Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função dada. Os métodos de descida são uma estratégia natural para resolver problemas de otimização irrestritas.

Estes métodos possuem o seguinte processo : Dados $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $x_k \in \mathbb{R}^n$ uma aproximação da solução do problema (1), encontramos o ponto $x_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz

$$f(x_{k+1}) < f(x_k).$$

Uma estratégica prática é tomar uma direção $d_k \in \mathbb{R}^n$ da tal forma f assuma valores decrescente, preferencialmente à passos curtos, a partir do ponto x_k nessa mesma direção. Calcula-se o comprimento de passo $\alpha_k > 0$ que fornece um valor de f menor do que no ponto x_k, isto é,

$$f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k),$$

e então definimos o próximo iterado sendo $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. Este processo se repete para o novo x_{k+1}, e assim sucessivamente.

Definição 1.6.1. *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função e considere $x \in \mathbb{R}^n$ e $d \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}$. Dizemos que d é uma direção de descida para f, a partir de x, se existe $\delta > 0$ tal que*

$$f(x + \alpha d) < f(x), \quad \textit{para todo } \alpha \in (0, \delta).$$

Denotamos por $D_f(x)$ o conjunto de todas as direções de descida da função f no ponto x.

Lema 1.6.1. ([9], *p.25*) *Seja $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função diferenciável no ponto $x \in \mathbb{R}^n$. Então:*

(i) Para todo $d \in D_f(x)$, tem-se $\langle \nabla f(x), d \rangle \leq 0$.

(ii) Se $d \in \mathbb{R}^n$ satisfaz $\langle \nabla f(x), d \rangle < 0$, tem-se que $d \in D_f(x)$.

Busca de Armijo

Seja $x \in \mathbb{R}^n$ e $d \in \mathbb{R}^n$ uma direção de descida. Considere $\omega \in (0, 1)$. Basicamente, a regra de Armijo encontra $\overline{\alpha} > 0$ tal que

$$f(x + \overline{\alpha} d) \leq f(x) + \omega \overline{\alpha} \langle \nabla f(x), d \rangle.$$

A desigualdade acima significa que queremos mais que uma simples redução do valor de f. Esta redução deve ser proporcional ao tamanho do passo. O resultado a seguir nos diz que a obtenção do descenso baseado na condição de Armijo é sempre possível.

Teorema 1.6.1. ([15], *p.77*) *Considere uma função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciável, um ponto $x \in \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n$ uma direção de descida e $\omega \in (0, 1)$. Então existe $\delta > 0$ tal que*

$$f(x + \alpha d) \leq f(x) + \omega \alpha \langle \nabla f(x), d \rangle, \ \textit{para todo } \alpha \in [0, \delta).$$

Observação 1.6.1. *Deve-se obter um comprimento do passo α que resulte no decréscimo suficiente da função f em relação ao valor $f(x_k)$.*

Inicialmente para a busca de Armijo, fazemos $\alpha = 1$, e são dados $x_k \in \mathbb{R}^n$ e $d_k \in \mathbb{R}^n$, onde d_k é uma direção de descida. Escolha as constantes $\tau, \omega \in (0, 1)$ e inicia-se as iterações do seguinte modo.

Passo 1. Verifique que vale a desigualdade

$$f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \omega \alpha_k \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle. \tag{1.13}$$

Passo 2. Se vale (1.13) tome $\alpha_k = \alpha$ e faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. Caso contrário tomamos $\alpha = \tau \alpha$ e retornamos ao passo 1.

1.7 Método de Newton com Busca de Armijo

Basicamente o método de Newton com Busca de Armijo tem o seguinte formato. Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$, segue-se os procedimentos abaixo.

Algoritmo de Newton

Passo 1. Se $\nabla f(x_k) = \vec{0}$, pare. Se não.

Passo 2. defina $d_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$.

Passo 3. Calcule α_k pela busca de Armijo em seguida defina $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ e retorne ao passo 1.

Observação 1.7.1. *A direção d_k do método de Newton é obtida resolvendo-se o sistema de equações lineares*

$$\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k),$$

observe que a direção de Newton pode não estar bem definida caso a matriz Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$ seja singular. Ainda que possa ser determinado d_k, esta direção pode não ser de descida. Porém, se $\nabla^2 f(x_k)$ é definida positiva, teremos que d_k está bem definido e é um direção de descida. De fato,

$$\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle = -\langle \nabla^2 f(x_k) d_k, d_k \rangle < 0,$$

segue de (ii) do lema 1.6.1 que d_k e direção de descida a partir de x_k.

Para um caso mais geral quando $\nabla^2 f(x_k)$ não é definida positiva deve-se fazer uma regularização em d_k, de forma que d_k seja bem definida e um direção de descida. A ideia consiste em escolher $\delta_k \geq 0$ tal que a matriz $\nabla^2 f(x_k) + \delta_k I$ seja definida positiva e a direção do método de Newton passa ser $d_k = -(\nabla^2 f(x_k) + \delta_k I)^{-1} \nabla f(x_k)$.

Para um estudo mais aprofundado dos métodos de descida, em particular de Newton, recomendamos [10] ou [15]. A seguir apresentamos os algoritmos os quais são nossos objetos de estudos.

Capítulo 2

Descrição do Algoritmo e Análise de Convergência

Neste capítulo apresentamos o algoritmo composto por Algoritmo 1 e Algoritmo 2 para encontrar uma solução do problema (1). Nosso próximo objetivo será mostrarmos a convergência global e local do algoritmo que foi proposto em [1] para resolver problemas de otimização irrestrita quando f é uma função duas vezes diferenciável e limitada inferiormente.

2.1 Descrição do Algoritmo

Inicialmente apresentamos o Algoritmo 1. Dado um ponto $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Em seguida escolhemos um número inteiro $l \geq 0$ e as constantes $\rho \in (0,1), \gamma > 0, \sigma \in (0,1)$ e $\overline{\theta} > 0$. A estrutura deste algoritmo é dado como a seguir.

ALGORITMO 1

Passo 1. Se $\nabla f(x_k) = 0$, então pare. Caso contrário vá ao,

Passo 2. Escolha $\delta_k \geq 0$ tal que $H_k = \nabla^2 f(x_k) + \delta_k I \succeq 0$ e defina

$$\theta_k = \min\{\gamma \|\nabla f(x_k)\|^\sigma, \overline{\theta}\}.$$

Passo 3. Calcule x_k^+ resolvendo o sistema linear

$$(H_k + \theta_k I)(x_k^+ - x_k) = -\nabla f(x_k).$$

Passo 4. Faça $l_k = \max\{0, k - l\}$ e $\varepsilon_k = \rho \max\{\|\nabla f(x_i)\| : l_k \leq i \leq k\}$.

Passo 5. Se $\varphi_k(x_k^+) \leq f(x_k)$ e $\|\nabla \varphi_k(x_k^+)\| \leq \varepsilon_k$, então faça $x_{k+1} = x_k^+$ e volte ao Passo 1. Caso contrário, a partir de um ponto inicial $x_{k,0}$ tal que $\varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k)$ vá ao Algoritmo 2 para encontrar x_{k+1} tal que

$$\varphi_k(x_{k+1}) \leq f(x_k) \text{ } e \text{ } \|\nabla \varphi_k(x_{k+1})\| \leq \varepsilon_k. \tag{2.1}$$

O parâmetro de regularização δ_k no passo 2 deve ser escolhido de modo que exista $\beta_1 \geq 1$ tal que

$$\delta_k \leq \beta_1 \max\{0, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x_k))\}, \quad \text{para todo } k \in \mathbb{N}. \tag{2.2}$$

A condição (2.2) será utilizada na análise de convergência local. A forma mais simples de satisfazer (2.2) é definir $\delta_k = \beta_1 \max\{0, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x_k))\}$. Isso é feito em [20].

Note que, definimos $\theta_k = \min\{\gamma\|\nabla f(x_k)\|^{\sigma}, \overline{\theta}\}$ no passo 2 se o passo 1 não é satisfeito. Além disso se $\nabla f(x_k) \to \vec{0}$ temos que $\lim\limits_{k\to\infty} \theta_k = 0$. Se o passo 1 não é satisfeito, também no passo 2 $\delta_k \geq 0$ deve ser escolhido de modo que a matriz H_k seja semi-definida positiva. Assim a matriz $H_k + \theta_k I$ é definida positiva, então usando (7) temos

$$\langle \nabla f(x_k), x_k^+ - x_k\rangle = -\langle (H_k + \theta_k I)(x_k^+ - x_k), (x_k^+ - x_k)\rangle < 0,$$

pelo item (ii) do lema 1.6.1 o ponto $(x_k^+ - x_k)$ é uma direção de descida para f a partir de x_k. Como $H_k + \theta_k I$ é definida positiva logo é também invertível, desse modo o iterado de teste x_k^+ é dado por

$$x_k^+ = -(H_k + \theta_k I)^{-1}\nabla f(x_k) + x_k.$$

A definição de ε_k no passo 5 é valida somente se o inteiro $l \geq 0$, por exemplo, se estamos na iteração $k = 2$ e tivéssemos escolhido $l = -1$, teríamos $l_2 = 3$ e daí $l_2 = 3 \leq i \leq 2$, o que é uma incoerência.

Observe que, se $k \geq l$ tem-se $l_k = k - l$ e, se $l > k$ temos $l_k = 0$. Como $\nabla\varphi_k(x_k) = \nabla f(x_k)$, note que, quando $l = 0$ temos $l_k = \max\{0, k - l\} = k$ e, assim $i = k$, portanto a segunda desigualdade do teste de aceitação no passo 5 é da forma $\|\nabla\varphi_k(x_{k+1})\| \leq \rho\|\nabla\varphi_k(x_k)\|$. Este requisito pode ser muito exigente e é por isso que introduz-se um relaxamento da tolerância de aceitação ε_k tomando os valores máximos de $\|\nabla f\|$ nas últimas l iterações. Esta estratégia melhora a eficiência do algoritmo e garante sua convergência global.

Usando o teorema 1.4.2, uma garantia de que sempre existe (pelo menos um) $x_{k,0}$ tal que $\varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k)$ é a coercividade e a continuidade da função φ_k. Com θ_k obtido no passo 2 resolve-se o problema proximal e encontra-se $x_{k,0}$ tal que $\varphi_k(x_{k,0}) \leq \varphi_k(x), \forall\, x \in \mathbb{R}^n$. Em particular para $x = x_k$ e usando a definição da função φ_k temos $\varphi_k(x_{k,0}) \leq \varphi_k(x_k) = f(x_k)$. Por outro lado, pode ser que exista um outro ponto $x_{k,0}$ tal que $\varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k)$ sem que $x_{k,0}$ seja solução do problema proximal.

Se o novo iterado x_k^+ não satisfazer as desigualdades no passo 5 do Algoritmo 1, o Algoritmo 2 é chamado. O Algoritmo a seguir é um método de minimização de descida aplicado para o problema (6) com um valor fixo do parâmetro de regularização θ_k determinado no Algoritmo 1. De início um iterado $x_{k,0}$ deve ser escolhido. Escolhemos também uma constante $\omega \in (0,1)$ para a condição de Armijo e definimos inicialmente $i = 0$. O Algoritmo 2 é organizado da seguinte forma.

ALGORITMO 2

Passo 1. Se $\varphi_k(x_{k,i}) \leq f(x_k)$ e $\|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\| \leq \varepsilon_k$, então defina $x_{k+1} = x_{k,i}$ e retorne para o algoritmo 1. Caso contrário siga para o,

Passo 2. Escolha $\delta_{k,i} \geq 0$ tal que $H_{k,i} = \nabla^2 f(x_{k,i}) + \delta_{k,i} I \succeq 0$.

Passo 3. Calcule $d_{k,i}$ resolvendo o sistema linear

$$(H_{k,i} + \theta_k I)d_{k,i} = -\nabla\varphi_k(x_{k,i}). \tag{2.3}$$

Passo 4. Começando com $\alpha_{k,i} = 1$ aplique a busca de Armijo para encontrar $\alpha_{k,i} \in (0,1]$ tal que

$$\varphi_k(x_{k,i} + \alpha_{k,i}d_{k,i}) \leq \varphi_k(x_{k,i}) + \omega\alpha_{k,i}\langle\nabla\varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i}\rangle,$$

e então defina $x_{k,i+1} = x_{k,i} + \alpha_{k,i}d_{k,i}$ e retorne ao passo 1 do Algoritmo 2.

A escolha do parâmetro de regularização $\delta_{k,i}$ no passo 2 deve ser feita como no Algoritmo 1, sendo

$$\delta_{k,i} \leq \beta_2 \max\{0, \lambda_{\min}(\nabla^2 f(x_{k,i}))\}, \text{ para toda iteração } \quad i, \tag{2.4}$$

com $\beta_2 \geq 1$. A expressão (2.4) visa garantir a finitude do Algoritmo 2.

Como $\delta_{k,i} \geq 0$ é escolhido de forma que a matriz $H_{k,i}$ seja semi-definida positiva, então a matriz $H_{k,i} + \theta_k I$ é definida positiva e portanto invertível, logo

$$d_{k,i} = -(H_{k,i} + \theta_k I)^{-1} \nabla \varphi_k(x_{k,i}).$$

Além disso $d_{k,i}$ é uma direção de descida para φ_k a partir de $x_{k,i}$.

2.2 Análise de Convergência

Com os resultados vistos no capítulo 1 e descrição do Algoritmo, ressaltamos que estaremos fazendo uma reprodução mais detalhada dos resultados contidos em [1]. Mostraremos que o algoritmo referido na seção 2.1 é globalmente convergente com as hipóteses de que f é duas vezes diferenciável e limitada inferiormente. E sobre algumas hipóteses bastante comum em análise local de algoritmos (de descida) mostraremos que o algoritmo converge localmente para uma solução do problema (1).

2.2.1 Convergência global

A demonstração do resultado a seguir é baseada em ([6], lema 4.1, pg.737) e, este será um teorema essencial para estabelecermos a finitude do algoritmo 2.

Teorema 2.2.1. *Considere $f : \Omega \to \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 duas vezes diferenciável no convexo e aberto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Suponha que exista $M > 0$ tal que*

$$\langle z, \nabla^2 f(x) z \rangle \leq M \|z\|^2, \quad \text{para todo } x \in \Omega \quad \text{e para todo } z \in \mathbb{R}^n. \tag{2.5}$$

Para qualquer $x_k \in \Omega$ e qualquer $d_k \in \mathbb{R}^n$ tal que $\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle < 0$, existe uma constante $\eta > 0$ tal que o comprimento $\alpha_k > 0$ produzido pela busca de Armijo satisfaz,

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \eta \max \left\{ \frac{\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle^2}{\|d_k\|^2}, \langle -\nabla f(x_k), d_k \rangle \right\}.$$

Demonstração. Sejam $x_k \in \Omega$ e $d_k \in \mathbb{R}^n$ quaisquer e tais que $\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle < 0$. Se a busca de Armijo é satisfeita com $\alpha_k = 1$ então temos

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \omega \langle -\nabla f(x_k), d_k \rangle. \tag{2.6}$$

Suponha que $\alpha_k < 1$, o que significa que a busca de Armijo falho para algum comprimento $\alpha' \leq \dfrac{\alpha_k}{\tau}$, isto é,

$$f(x_k + \alpha' d_k) - f(x_k) > \omega \alpha' \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle. \tag{2.7}$$

Sendo Ω aberto para $\alpha' > 0$ suficientemente pequeno tem-se que $x_k + \alpha' d_k \in \Omega$ e, como $x_k \in \Omega$ a convexidade de Ω garante que $[x_k, x_k + \alpha' d_k] \subset \Omega$, além disso f é diferenciável em Ω, portanto, pelo teorema 1.2.5 existe $\theta \in (0, 1)$ tal que

$$f(x_k + \alpha' d_k) - f(x_k) = \langle \nabla f(x_k), \alpha' d_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \alpha' d_k, \nabla^2 f(x_k + \theta \alpha' d_k) \rangle. \tag{2.8}$$

Levando (2.8) em (2.7) temos que

$$\langle \nabla f(x_k), \alpha' d_k \rangle + \frac{1}{2}\langle \alpha' d_k, \nabla^2 f(x_k + \theta\alpha' d_k)\rangle > \omega\alpha' \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle. \tag{2.9}$$

Como $x_k + \theta\alpha' d_k \in \Omega$, de (2.9) e usando (2.5) temos

$$\begin{aligned}
(\omega - 1)\alpha' \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle &< \frac{1}{2}\langle \alpha' d_k, \nabla^2 f(x_k + \theta\alpha' d_k)\alpha' d_k \rangle \\
&= \frac{1}{2}\alpha'^2 \langle d_k, \nabla^2 f(x_k + \theta\alpha' d_k) d_k \rangle \\
&\leq \frac{1}{2} M \alpha'^2 \|d_k\|^2 \\
&< M\alpha'^2 \|d_k\|^2,
\end{aligned}$$

daí, obtêm-se

$$\alpha' > \frac{(\omega - 1)\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle}{M\|d_k\|^2},$$

assim

$$\alpha_k \geq \alpha'\tau > \frac{\tau(\omega - 1)\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle}{M\|d_k\|^2} = -\frac{\tau(1 - \omega)\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle}{M\|d_k\|^2}. \tag{2.10}$$

(2.10) na condição de Armijo nos dá

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq -\frac{\tau\omega(1 - \omega)\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle^2}{M\|d_k\|^2},$$

donde segue que

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \frac{\tau\omega(1 - \omega)\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle^2}{M\|d_k\|^2} \tag{2.11}$$

tomando $\eta = \min\left\{\omega, \dfrac{\tau\omega(1-\omega)}{M}\right\} > 0$, de (2.6) e (2.11) temos

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq \eta \max\left\{\frac{\langle \nabla f(x_k), d_k \rangle^2}{\|d_k\|^2}, \langle -\nabla f(x_k), d_k \rangle\right\},$$

como queríamos demonstrar. □

O lema a seguir estabelece a finitude do algoritmo 2.

Lema 2.2.1. *Suponha que em uma iteração k do algoritmo 1, o algoritmo 2 é chamado com um ponto de partida $x_{k,0}$ tal que $\varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k)$. Suponha que f seja duas vezes diferenciável sobre um conjunto convexo e aberto Ω contendo o conjunto de nível*

$$\mathfrak{L}_k = \{x \in \mathbb{R}^n : \varphi_k(x) \leq \varphi_k(x_{k,0})\}$$

e que f é limitada inferiormente em Ω. Então, o algoritmo 2 termina após um número finito de iterações e retorna a um ponto x_{k+1} de tal modo que as condições em (2.1) são satisfeitas.

Demonstração. Seja $k \in \mathbb{N}$ fixo. Como o Algoritmo 2 é um Algoritmo de descida o valor de φ_k é decrescente , então para qualquer iteração i no Algoritmo 2 temos que $\varphi_k(x_{k,i}) \leq \varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k)$. Portanto, a primeira desigualdade do critério de parada no passo 1 do algoritmo 2 é satisfeita em cada iteração i. Supondo, que o algoritmo 2 não termina e gera uma sequência infinita $\{x_{k,i}\}_i$. Vamos mostrar que $\{x_{k,i}\}_i$ é limitada e todo ponto de acumulação é um ponto estacionário do problema (6), contradizendo o fato de que $\|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\| > \varepsilon_k$, para todo $i \in \mathbb{N}$.

Como f é limitada inferiormente em Ω, existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $f(x) \geq \alpha > -\infty$ para todo $x \in \Omega$. Sendo x_k fixo, de $f(x) \geq \alpha$ temos

$$\begin{aligned}
\varphi_k(x) &= f(x) + \frac{\theta_k}{2}\|x - x_k\|^2 \\
&= f(x) + \frac{\theta_k}{2}\left(\|x\|^2 - 2\langle x, x_k\rangle + \|x_k\|^2\right) \\
&\geq \alpha + \frac{\theta_k}{2}\left(\|x\|^2 - 2\|x\|\|x_k\| + \|x_k\|^2\right) \\
&= \alpha + \frac{\theta_k}{2}\left(\|x\| - \|x_k\|\right)^2,
\end{aligned}$$

e como $0 < \theta_k = \min\{\gamma\|\nabla f(x_k)\|^\sigma, \overline{\theta}\}$ tem-se que $\lim\limits_{\|x\|\to\infty} \varphi_k(x) = +\infty$, logo φ_k é coerciva em Ω. E, além disso como f e a função $\|.\|^2$ são contínuas, φ_k também é contínua.

Mostraremos que $\mathfrak{L}_k$ é não vazio e compacto. Seja $x_{k,i} \in \mathbb{R}^n$, como φ_k é decrescente temos $\varphi_k(x_{k,i}) \leq \varphi_k(x_{k,0})$, portanto $x_{k,i} \in \mathfrak{L}_k$ e assim $\mathfrak{L}_k \neq \emptyset$. Considere $\{y_n\} \subset \mathfrak{L}_k$ uma sequência tal que $\lim\limits_{n\to\infty} y_k = \overline{y} \in \mathbb{R}^n$. Como $y_n \in \mathfrak{L}_k$ temos $\varphi_k(y_n) \leq \varphi_k(x_{k,0})$. Usando a continuidade de φ_k tem-se

$$\varphi_k(\overline{y}) = \lim_{n\to\infty} \varphi_k(y_n) \leq \lim_{n\to\infty} \varphi_k(x_{k,0}) = \varphi_k(x_{k,0}),$$

daí temos que $\overline{y} \in \mathfrak{L}_k$ e portanto $\mathfrak{L}_k$ é fechado. Suponha que $\mathfrak{L}_k$ não é limitado. Assim existe uma sequência $\{y_n\} \subset \mathfrak{L}_k$ tal que $\lim\limits_{n\to\infty} \|y_n\| = +\infty$, e como $\varphi_k(y_n) \leq \varphi_k(x_{k,0})$, temos

$$\lim_{\|y_n\|\to\infty} \varphi_k(y_n) \leq \lim_{\|y_n\|\to\infty} \varphi_k(x_{k,0}) = \varphi_k(x_{k,0}),$$

mas, pela coercividade de φ_k temos que $\lim\limits_{\|y_n\|\to\infty} \varphi_k(y_n) = +\infty$ e assim

$$+\infty \leq \varphi_k(x_{k,0}),$$

o que é um absurdo. Logo $\mathfrak{L}_k$ é limitado. Como $\mathfrak{L}_k$ é não vazio, fechado e limitado concluímos que $\mathfrak{L}_k$ é não vazio e compacto. E ainda, já sabemos que $\{x_{k,i}\} \subset \mathfrak{L}_k$, sendo $\mathfrak{L}_k$ compacto tem-se que a sequência $\{x_{k,i}\}$ é limitada.

Defina a função $\phi_k : \mathfrak{L}_k \to \mathbb{R}$, dada por $\phi_k(x) = \|\nabla^2 f(x)\|$, onde $k \in \mathbb{N}$ é fixo. Como ϕ_k é contínua e $\mathfrak{L}_k$ é não vazio e compacto pelo teorema de Weiertrass, existem $x^*, \overline{x} \in \mathfrak{L}_k$ tais que $\phi_k(x^*) \leq \phi_k(x) \leq \phi_k(\overline{x})$ para todo $x \in \mathfrak{L}_k$, isto é, $\|\nabla^2 f(x^*)\| \leq \|\nabla^2 f(x)\| \leq \|\nabla^2 f(\overline{x})\|$ para todo $x \in \mathfrak{L}_k$, daí temos

$$\|\nabla^2 f(x)\| \leq \|\nabla^2 f(\overline{x})\| = \|\nabla^2\varphi_k(\overline{x}) - \theta_k I\| \leq \|\nabla^2\varphi_k(\overline{x})\| + \theta_k,$$

fazendo $h = \|\nabla^2\varphi_k(\overline{x})\| + \theta_k$ para cada $k \in \mathbb{N}$ fixo, por definição de θ_k temos que $h > 0$, desse modo

$$\|\nabla^2 f(x)\| \leq h, \quad \forall\, x \in \mathfrak{L}_k. \tag{2.12}$$

Agora fazemos $\overline{\lambda} = \|\nabla^2 f(\overline{x})\| \geq 0$. Considere $\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))$ o menor autovalor da matriz $\nabla^2 f(x)$, então por definição existe $v \in \mathbb{R}^n \backslash \{\vec{0}\}$ tal que $\nabla^2 f(x)v = \lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))v$ e assim

$$\|\nabla^2 f(x)v\| = \|\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))v\| = |\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))|\|v\|.$$

Usando que $-a \leq |a| \quad \forall\, a \in \mathbb{R}$ temos

$$-\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))\|v\| \leq |\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))|\|v\| = \|\nabla^2 f(x)v\| \leq \|\nabla^2 f(x)\|\|v\|,$$

e como $\|v\| \neq 0$ segue que, $-\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x)) \leq |\|\nabla^2 f(x)\|$, daí temos

$$-\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x)) \leq \|\nabla^2 f(x)\| \leq \|\nabla^2 f(\overline{x})\|, \quad \forall\, x \in \mathfrak{L}_k.$$

isto é,

$$-\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x)) \leq \overline{\lambda}, \quad \forall\, x \in \mathfrak{L}_k,$$

portanto

$$\max\{0, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))\} \leq \overline{\lambda}, \quad \forall\, x \in \mathfrak{L}_k. \tag{2.13}$$

Seja $i \in \mathbb{N}$. Como $\{x_{k,i}\}_i$ está contida em $\mathfrak{L}_k$, usando a definição de $H_{k,i}$ no passo 2 do Algoritmo 2, por (2.12), (2.4) e (2.13) temos

$$\|H_{k,i}\| \leq \|\nabla^2 f(x_{k,i})\| + \delta_{k,i} \leq h + \beta_2 \max\{0, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x_{k,i}))\} \leq h + \beta_2\overline{\lambda}, \tag{2.14}$$

Além disso, a matriz $H_{k,i}$ sendo semi-definida positiva temos

$$\lambda_{\min}(H_{k,i} + \theta_k I) \geq \theta_k > 0. \tag{2.15}$$

Como f é duas vezes diferenciável, para $\varphi_k : \Omega \to \mathbb{R}$ temos que φ_k é duas vezes diferenciável. Considere $x \in \Omega$ qualquer e fixo, então definimos $c = \|\nabla^2 f(x)\| \geq 0$. Seja $z \in \mathbb{R}^n$ qualquer, assim

$$\begin{aligned}
\langle z, \nabla^2\varphi_k(x)z\rangle &\leq \|z\|^2\|\nabla^2\varphi_k(x)\| \\
&= \|z\|^2\|\nabla^2 f(x) + \theta_k I\| \\
&\leq \|z\|^2(\|\nabla^2 f(x)\| + \theta_k) \\
&= \|z\|^2(c + \theta_k),
\end{aligned}$$

portanto existe $M = c + \theta_k > 0$ tal que

$$\langle z, \nabla^2\varphi_k(x)z\rangle \leq M\|z\|^2, \text{ para todo } x \in \Omega \text{ e todo } z \in \mathbb{R}^n.$$

Como $x_{k,i} \in \Omega$ e $d_{k,i} \in \mathbb{R}^n$ são tais que $\langle \nabla\varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i}\rangle < 0$ pois no algoritmo 2 $d_{k,i}$ é uma direção de descida a partir de $x_{k,i}$, pelo teorema 2.2.1 existe uma constante $\eta > 0$ tal que o comprimento $\alpha_{k,i} > 0$ gerado pela busca de Armijo cumpre,

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta \max\left\{\frac{\langle \nabla\varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i}\rangle^2}{\|d_{k,i}\|^2}, \langle -\nabla\varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i}\rangle\right\}, \tag{2.16}$$

onde η é uma constante positiva. Por (2.16) sabemos que

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta \frac{\langle \nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle^2}{\|d_{k,i}\|^2}, \tag{2.17}$$

e

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta \langle -\nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle. \tag{2.18}$$

Usando (2.3) e que $H_{k,i} \succeq 0$, temos

$$\langle -\nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle = \langle H_{k,i} d_{k,i}, d_{k,i} \rangle + \theta_k \|d_{k,i}\|^2 \geq \theta_k \|d_{k,i}\|^2, \tag{2.19}$$

e ainda usando (2.3) e (2.14) temos

$$\begin{array}{rcl}
\|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\| & = & \|(H_{k,i} + \theta_k I) d_{k,i}\| \\
& \leq & \|H_{k,i} d_{k,i}\| + \theta_k \|d_{k,i}\| \\
& \leq & \|H_{k,i}\| \|d_{k,i}\| + \theta_k \|d_{k,i}\| \\
& \leq & (h + \beta_2 \overline{\lambda}) \|d_{k,i}\| + \theta_k \|d_{k,i}\| \\
& = & (h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k) \|d_{k,i}\|,
\end{array}$$

daí, tem-se

$$\|d_{k,i}\| \geq \frac{\|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\|}{(h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k)}. \tag{2.20}$$

Levando (2.20) em (2.19) obtemos

$$\langle -\nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle \geq \frac{\theta_k}{(h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k)^2} \|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\|^2, \tag{2.21}$$

(2.21) em (2.18) temos

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta \frac{\theta_k}{(h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k)^2} \|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\|^2. \tag{2.22}$$

Também temos

$$\begin{array}{rcl}
\dfrac{\langle \nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle^2}{\|d_{k,i}\|)^2} & = & \dfrac{\langle -(H_{k,i} + \theta_k I) d_{k,i}, d_{k,i} \rangle^2}{\|d_{k,i}\|)^2} \\
& = & \dfrac{(\langle H_{k,i} d_{k,i}, d_{k,i} \rangle + \theta_k \|d_{k,i}\|^2)^2}{\|d_{k,i}\|^2} \\
& \geq & \dfrac{(\theta_k \|d_{k,i}\|^2)^2}{\|d_{k,i}\|^2} \\
& = & \theta_k^2 \|d_{k,i}\|^2,
\end{array}$$

e assim por (2.20)

$$\frac{\langle \nabla \varphi_k(x_{k,i}), d_{k,i} \rangle^2}{\|d_{k,i}\|)^2} \geq \frac{\theta_k^2}{(h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k)^2} \|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\|^2, \tag{2.23}$$

(2.23) em (2.17) nos dá,

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta \frac{\theta_k^2}{(h + \beta_2 \overline{\lambda} + \theta_k)^2} \|\nabla \varphi_k(x_{k,i})\|^2. \tag{2.24}$$

De (2.22) e (2.24), temos

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \frac{\eta\theta_k \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\|^2}{(h + \beta_2\overline{\lambda} + \theta_k)^2} \max\{1, \theta_k\},$$

fazendo $\eta' = \dfrac{\eta\theta_k \max\{1, \theta_k\}}{(h + \beta_2\overline{\lambda} + \theta_k)^2}$, ($\eta'$ é constante pois k é fixo) temos

$$\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1}) \geq \eta' \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\|^2.$$

Como $\varphi_k(x) \geq \alpha > -\infty$ para todo $x \in \mathfrak{L}_k$, isto significa que φ_k é limitada inferiormente em $\mathfrak{L}_k$, então somando esta última desigualdade em i,

$$\begin{aligned} \eta' \sum_{i=0}^{m} \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\|^2 &\leq \sum_{i=0}^{m} [\varphi_k(x_{k,i}) - \varphi_k(x_{k,i+1})] \\ &= [\varphi_k(x_{k,0}) - \varphi_k(x_{k,1})] + \cdots + [\varphi_k(x_{k,m}) - \varphi_k(x_{k,m+1})] \\ &= \varphi_k(x_{k,0}) - \varphi_k(x_{k,m+1}) \\ &\leq \varphi_k(x_{k,0}) - \alpha, \end{aligned}$$

por tanto

$$\sum_{i=0}^{m} \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\|^2 \leq \frac{1}{\eta'}[\varphi_k(x_{k,0}) - \alpha] < \infty,$$

logo a série $\displaystyle\sum_{i=0}^{\infty} \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\|^2$ é convergente, e assim pelo teorema 1.1.1 temos que, $\displaystyle\lim_{i\to\infty} \|\nabla\varphi_k(x_{k,i})\| = 0$, e isto finaliza a prova. □

Agora podemos mostrar a convergência global do algoritmo 1.

Teorema 2.2.2. *Suponha que f seja duas vezes diferenciável sobre um conjunto convexo aberto Ω contendo o conjunto de nível*

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

e que f é limitada inferiormente em Ω. Seja x_k o iterado gerado pelo Algoritmo 1. Então ou, existe um índice $k \in \mathbb{N}$ tal que $\nabla f(x_k) = 0$ e o algoritmo para ou uma sequencia infinita $\{x_k\}$ é gerada e $\{\nabla f(x_k)\}$ converge para $\vec{0}$.

Demonstração. Suponha que o algoritmo não pare. Mostraremos por indução em $k \in \mathbb{N}$ que $\{x_k\} \subset \mathcal{L}$. O caso $k = 0$ é claro pois $x_0 \in \mathcal{L}$. Suponha agora que $x_k \in \mathcal{L}$ para todo $k \in \mathbb{N}$, ou seja, $f(x_k) \leq f(x_0)$. Provaremos que $x_{k+1} \in \mathcal{L}$. Existem dois casos.

O primeiro é quando $x_{k+1} = x_k^+$. O critério de aceitação no passo 5 e a suposição de indução implicam que

$$f(x_{k+1}) = f(x_k^+) \leq \varphi_k(x_k^+) \leq f(x_k) \leq f(x_0),$$

e assim $x_{k+1} \in \mathcal{L}$.

O segundo caso é quando o algoritmo 2 é chamado. Seja $\mathfrak{L}_k$ o conjunto definido no lema 2.2.1. Considere $y \in \mathfrak{L}_k$, assim $\varphi_k(y) \leq \varphi_k(x_{k,0})$, então usando a primeira desigualdade no passo 1 do Algoritmo 2 e a hipótese de indução temos

$$f(y) \leq \varphi_k(y) \leq \varphi_k(x_{k,0}) \leq f(x_k) \leq f(x_0),$$

o que significa que $y \in \mathcal{L}$, logo $\mathfrak{L}_k \subset \mathcal{L}$. Pelo lema 2.2.1, o algoritmo 2 termina após um número finito de iterações internas e retorna x_{k+1} tal que as desigualdades em (2.1) são satisfeitas. Então, usando a primeira desigualdade em (2.1) e novamente a hipótese de indução temos

$$f(x_{k+1}) \leq \varphi_k(x_{k+1}) \leq f(x_k) \leq f(x_0),$$

e portanto $x_{k+1} \in \mathcal{L}$.

Agora vamos mostrar que $\{\nabla f(x_k)\}$ converge para $\vec{0}$. Por definição de φ_k e pela primeira desigualdade em (2.1), para todo $k \in \mathbb{N}$, temos

$$f(x_{k+1}) + \frac{\theta_k}{2}\|x_{k+1} - x_k\|^2 = \varphi_k(x_{k+1}) \leq f(x_k).$$

Daí, tem-se

$$\theta_k\|x_{k+1} - x_k\|^2 \leq 2(f(x_k) - f(x_{k+1})),$$

e como $\theta_k > 0$ e por definição de θ_k, $\theta_k \leq \overline{\theta}$, então

$$\theta_k^2\|x_{k+1} - x_k\|^2 \leq 2\theta_k(f(x_k) - f(x_{k+1})) \leq 2\overline{\theta}(f(x_k) - f(x_{k+1})).$$

Como f é limitada inferiormente em Ω temos que f é limitada inferiormente em $\mathcal{L}$, ou seja, existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que $f(x) \geq \alpha > -\infty$ para todo $x \in \mathcal{L}$. Assim

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{l} \theta_k^2\|x_{k+1} - x_k\|^2 &\leq 2\overline{\theta}\sum_{k=0}^{l}(f(x_k) - f(x_{k+1})) \\
&= 2\overline{\theta}[f(x_0) - f(x_1) + f(x_1) - f(x_2) + \cdots + f(x_l) - f(x_{l+1})] \\
&= 2\overline{\theta}[f(x_0) - f(x_{l+1})] \\
&\leq 2\overline{\theta}[f(x_0) - \alpha] \\
&< \infty,
\end{aligned}$$

por tanto a série $\displaystyle\sum_{k=0}^{\infty} \theta_k^2\|x_{k+1} - x_k\|^2$ é convergente, pelo teorema 1.1.1 segue que $\displaystyle\lim_{k\to\infty} \theta_k\|x_{k+1} - x_k\| = 0$.

Seja $k \in \mathbb{N}$. Temos $f(x_{k+1}) = \varphi_k(x_{k+1}) - \dfrac{\theta_k}{2}\|x_{k+1} - x_k\|^2$ e assim,

$$\nabla f(x_{k+1}) = \nabla\varphi_k(x_{k+1}) - \theta_k(x_{k+1} - x_k).$$

Então, usando a segunda desigualdade em (2.1) e a definição de ε_k no passo 4 do algoritmo 1, temos

$$\begin{aligned}
\|\nabla f(x_{k+1})\| &= \|\nabla\varphi_k(x_{k+1}) - \theta_k(x_{k+1} - x_k)\| \\
&\leq \|\nabla\varphi_k(x_{k+1})\| + \theta_k\|(x_{k+1} - x_k)| \\
&\leq \varepsilon_k + \theta_k\|x_{k+1} - x_k\| \\
&= \rho\max\{\|\nabla f(x_i)\| : l_k \leq i \leq k\} + \theta_k\|x_{k+1} - x_k\|.
\end{aligned}$$

Usando a estratégia de ([2], proposição 1, p.412-413), para $k \in \mathbb{N}$, escrevemos a desigualdade acima como:

$$r_{k+1} \leq \rho\max\{r_i : l_k \leq i \leq k\} + \zeta_k, \tag{2.25}$$

onde $r_k := \|\nabla f(x_k)\|$ e $\zeta_k = \theta_k \|x_{k+1} - x_k\|$. Defina $\overline{\zeta} := \sup\{\zeta_k : k \in \mathbb{N}\}$ e $\overline{r} := \max\{r_0, \overline{\zeta}/(1-\rho)\}$. Mostraremos por indução em $k \in \mathbb{N}$ que $r_k \leq \overline{r}$. Caso $k = 0$, tem-se por definição de $\overline{r}$ que, $r_0 \leq \overline{r}$. Para um dado $k \in \mathbb{N}$, suponha que $r_i \leq \overline{r}$ para todo $0 \leq i \leq k$. Provaremos para $k+1$. Então de (2.25) temos

$$r_{k+1} \leq \rho r_i + \overline{\zeta} \leq \rho \overline{r} + \overline{\zeta} \leq \rho \overline{r} + \overline{r}(1-\rho) = \overline{r},$$

e assim $r_{k+1} \leq \overline{r}$. Consequentemente, provamos que o limite superior de $\{r_k\}$ é finito. Tomando o limite superior em (2.25), obtemos

$$\lim_{k\to\infty} \sup r_k \leq \rho \lim_{k\to\infty} \sup r_k + \lim_{k\to\infty} \sup \zeta_k.$$

Como $\lim\limits_{k\to\infty} \sup \zeta_k = 0$ e $\rho \in (0,1)$ temos, $0 \leq (1-\rho) \lim\limits_{k\to\infty} \sup r_k \leq 0$, daí

$$(1-\rho) \lim_{k\to\infty} \sup r_k = 0,$$

isto implica que $\lim\limits_{k\to\infty} \sup r_k = 0$, e assim $\lim\limits_{k\to\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0 \Leftrightarrow \lim\limits_{k\to\infty} \nabla f(x_k) = 0$, finalizando a prova. $\square$

2.2.2 Convergência local

A análise local do Algoritmo 1 será feito sobre as seguintes hipóteses.

Hipótese 1

(a) A função f é duas vezes diferenciável sobre um conjunto aberto contendo o conjunto $\mathcal{L} = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$.

(b) O conjunto de minimizadores X do problema (1.5) é não vazio.

(c) $\nabla^2 f$ é localmente Lipschitz contínua em uma vizinhança de $x^* \in X$, isto é, existe uma constante $\eta > 0$ suficientemente pequena e uma constante $L > 0$ tal que

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x - y\|, \text{ para todo } x, y \in B(x^*, \eta). \tag{2.26}$$

Sejam $x, y \in B(x^*, \eta)$ quaisquer e fixos. Temos

$$\|x - y\| \leq \|x - x^*\| + \|x^* - y\| = \|x - x^*\| + \|y - x^*\| < 2\eta,$$

então

$$\begin{aligned} \|\nabla^2 f(x)\| &\leq \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| + \|\nabla^2 f(y)\| \\ &\leq L\|x - y| + \|\nabla^2 f(y)\| \\ &< 2L\eta + \|\nabla^2 f(y)\| \\ &= l, \end{aligned}$$

isto significa que para todo $x \in B(x^*, \eta)$ existe $l > 0$ tal que $\|\nabla^2 f(x)\| \leq l$. Como ∇f é diferenciável em $B(x^*, \eta)$ e $B(x^*, \eta)$ é aberta e convexa, então pelo corolário 1.2.1 temos

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq l\|x - y\| \quad \text{para todo} \quad x, y \in B(x^*, \eta). \tag{2.27}$$

Por simplicidade, denotaremos por d função distância para o conjunto de minimizadores X, sendo

$$d(x) = \inf \|x - \xi\|, \text{ com } \xi \in X.$$

Pela continuidade da f o conjunto X é fechado. Assim, pelo teorema 1.4.3, para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$, existe $\overline{x} \in X$ tal que

$$d(x) = \|x - \overline{x}\|.$$

Hipótese 2 $\|\nabla f(x)\|$ fornece um erro local para o problema (1.5) em $B(x^*, \eta)$, isto é, existe uma constante $b > 0$ tal que

$$d(x) \leq b\|\nabla f(x)\|, \text{ para todo } x \in B(x^*, \eta) \tag{2.28}$$

e

$$\gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \leq \overline{\theta} \tag{2.29}$$

Prosseguindo, dado $x \in \mathbb{R}^n$, denotaremos por $\overline{x}$ uma escolha arbitrária de um elemento do conjunto de minimizadores X.

Para simplificar a notação, vamos remover o índice indexado k, e assim (7), (2.2) e a definição do parâmetro de regularização são como segue-se. Seja $x \in \mathbb{R}^n$ o iterado corrente. O novo iterado x^+ é a solução do sistema linear

$$(H + \theta I)(x^+ - x) = -\nabla f(x), \tag{2.30}$$

onde $H = \nabla^2 f(x) + \delta I$, o número δ é escolhido de forma que $H \succeq 0$ e

$$0 \leq \delta \leq \beta_1 \max\{0, -\lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))\}. \tag{2.31}$$

Levando (2.29) na definição de θ_k no passo 2 do Algoritmo 1, temos

$$\theta = \gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \tag{2.32}$$

Com as hipóteses aqui estabelecidas, o lema a seguir, cuja demonstração é baseada em ([19],lema 5.2, p.39-40) mostra que o parâmetro de regularização δ é limitado pela distância do iterado atual ao conjunto X.

Lema 2.2.2. *Para todo $x \in B(x^*, \eta/2)$ temos $\delta \leq \beta_1 L d(x)$.*

Demonstração. Seja $x \in B(x^*, \eta/2)$, assim $\|x - x^*\| < \eta/2$. Considere $\lambda = \lambda_{\min}(\nabla^2 f(x))$. Em vista de (2.31), basta mostrar que para $\lambda < 0$, temos $-\lambda \leq Ld(x)$. Pois se $-\lambda \leq Ld(x)$ tem-se,

$$0 \leq \delta \leq \beta_1 \max\{0, -\lambda\} = \beta_1(-\lambda) \leq \beta_1 L d(x).$$

Se $\lambda \geq 0$, por (2.31) temos, $0 \leq \delta \leq \beta_1 \max\{0, -\lambda\} = \beta_1.0 = 0$, logo $\delta = 0$ e o resultado vale imediatamente. Supondo agora que $\lambda < 0$, como $\overline{x}$ é um minimizador pelo teorema 1.5.2 a matriz $\nabla^2 f(\overline{x})$ é semi-definida positiva e, como $-\lambda > 0$ a matriz $\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I$ é definida positiva, e portanto invertível, assim pela proposição 1.3.3 tem-se, $\|(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}\| \leq -\dfrac{1}{\lambda}$. Temos que

$$\begin{aligned}
(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\overline{x})) &= (\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I) \\
&\quad + (\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(-\nabla^2 f(\overline{x}) + \lambda I) \\
&= (\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I) \\
&\quad - (\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I) \\
&= (\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I) - I.
\end{aligned}$$

Como λ é um autovalor da matriz $\nabla^2 f(x)$, a matriz $(\nabla^2 f(x) - \lambda I)$ é singular, então

$$\det((\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I)) = \det(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1} \det(\nabla^2 f(x) - \lambda I) = 0.$$

Isso significa que a matriz $(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I)$ também é singular. Pelo corolário 1.3.1 tem-se.

$$\begin{aligned}
1 &\leq \|(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \lambda I) - I\| \\
&= \|(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}(\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\overline{x}))\| \\
&\leq \|(\nabla^2 f(\overline{x}) - \lambda I)^{-1}\|\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\overline{x})\| \\
&\leq -\frac{1}{\lambda}\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\overline{x})\|.
\end{aligned}$$

Como X é fechado e não vazio então para todo $x \in B(x^*, \eta/2) \subset \mathbb{R}^n$ temos $\|x - \overline{x}\| \leq \|x - z\|$, para todo $z \in X$. Em particular para $z = x^* \in X$, temos $d(x) = \|x - \overline{x}\| \leq \|x - x^*\| < \frac{\eta}{2}$. Então $d(x) \leq \frac{\eta}{2}$, assim.

$$\begin{aligned}
\|\overline{x} - x^*\| &= \|\overline{x} - x + x - x^*\| \\
&\leq \|\overline{x} - x\| + \|x - x^*\| \\
&= \|x - \overline{x}\| + \|x - x^*\| \\
&= d(x) + \|x - x^*\| \\
&\leq \frac{\eta}{2} + \|x - x^*\| \\
&< \frac{\eta}{2} + \frac{\eta}{2} = \eta,
\end{aligned}$$

e assim $\overline{x} \in B(x^*, \eta)$. Usando (2.26) temos

$$1 \leq -\frac{1}{\lambda}\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(\overline{x})\| \leq -\frac{1}{\lambda} L\|x - \overline{x}\| = -\frac{1}{\lambda} L d(x),$$

donde segue que $-\lambda \leq L d(x)$. □

O lema a seguir fornece um limite superior no comprimento da solução do sistema linear (2.30) como uma função da distância da iteração atual ao conjunto de solução X.

Lema 2.2.3. *Seja* $c_1 = \frac{1}{2\gamma} L b^{\sigma} \eta^{1-\sigma}(1 + 2\beta_1) + 2$. *Para todo* $x \in B(x^*, \eta/2)$ *temos*

$$\|x^+ - x\| \leq c_1 d(x).$$

Demonstração. Considere $\delta \geq 0$ dado como no lema 2.2.2. Como $\overline{x}$ é ponto de mínimo pelo teorema 1.5.1 temos $\nabla f(\overline{x}) = \vec{0}$. Seja $x \in B(x^*, \eta/2)$. Por (2.30) e aplicando o corolário 1.2.2 (para ∇f) com $v = \overline{x} - x$, tem-se

$$\begin{aligned}
x^+ - x &= (H + \theta I)^{-1}(-\nabla f(x)) \\
&= (H + \theta I)^{-1}(\nabla f(\overline{x}) - \nabla f(x)) \\
&= (H + \theta I)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(\overline{x} - x))(\overline{x} - x) dt \\
&= (H + \theta I)^{-1} \int_0^1 \Big\{ \nabla^2 f(x + t(\overline{x} - x))(\overline{x} - x) - \nabla^2 f(x)(\overline{x} - x)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& +\nabla^2 f(x)(\overline{x}-x)\Big\}dt \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\Big\{\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& + \int_0^1 \nabla^2 f(x)(\overline{x}-x)dt\Big\} \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\Big\{\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +\nabla^2 f(x)(\overline{x}-x)\Big\} \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +(H+\theta I)^{-1}\nabla^2 f(x)(\overline{x}-x) \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +(H+\theta I)^{-1}(H-\delta I)(\overline{x}-x) \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +(H+\theta I)^{-1}H(\overline{x}-x) - (H+\theta I)^{-1}\delta(\overline{x}-x) \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +(H+\theta I)^{-1}H(\overline{x}-x) - (H+\theta I)^{-1}\delta(\overline{x}-x) + (H+\theta I)^{-1}\theta(\overline{x}-x) \\
& -(H+\theta I)^{-1}\theta(\overline{x}-x) \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +(H+\theta I)^{-1}(H+\theta I)(\overline{x}-x) - (\delta+\theta)(H+\theta I)^{-1}(\overline{x}-x) \\
= \;& (H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +\overline{x}-x-(\delta+\theta)(H+\theta I)^{-1}(\overline{x}-x).
\end{aligned}
$$

Por tirar a norma em ambos os lados e usando (2.26), temos

$$
\begin{aligned}
\|x^+ - x\| \;=\; & \|(H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt \\
& +\overline{x}-x-(\delta+\theta)(H+\theta I)^{-1}(\overline{x}-x)\| \\
\leq \; & \|(H+\theta I)^{-1}\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt\| \\
& +\|\overline{x}-x-(\delta+\theta)(H+\theta I)^{-1}(\overline{x}-x)\| \\
\leq \; & \|(H+\theta I)^{-1}\|.\|\int_0^1 (\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)dt\| \\
& +\|\overline{x}-x\| + (\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}(\overline{x}-x)\| \\
\leq \; & \|(H+\theta I)^{-1}\|.\int_0^1 \|(\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))(\overline{x}-x)\|dt \\
& +\|\overline{x}-x\| + (\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|(\overline{x}-x)\|
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\leq \|(H+\theta I)^{-1}\|. \int_0^1 \|(\nabla^2 f(x+t(\overline{x}-x)) - \nabla^2 f(x))\|.\|(\overline{x}-x)\|dt \\
&\quad +\|\overline{x}-x\| + (\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|(\overline{x}-x)\| \\
&\leq \|(H+\theta I)^{-1}\|. \int_0^1 L\|(x+t(\overline{x}-x)-x\|.\|(\overline{x}-x)\|dt \\
&\quad +\|\overline{x}-x\| + (\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|\overline{x}-x\| \\
&= \|(H+\theta I)^{-1}\|. \int_0^1 Lt\|\overline{x}-x\|.\|\overline{x}-x\|dt + \|\overline{x}-x\| \\
&\quad +(\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|\overline{x}-x\| \\
&= \|(H+\theta I)^{-1}\|. \int_0^1 Lt\|\overline{x}-x\|^2 dt + \|\overline{x}-x\| \\
&\quad +(\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|\overline{x}-x\| \\
&= \|(H+\theta I)^{-1}\|.\frac{L}{2}\|\overline{x}-x\|^2 + \|\overline{x}-x\| + (\delta+\theta)\|(H+\theta I)^{-1}\|.\|\overline{x}-x\|.
\end{aligned}
$$

Como H é semi-definida positiva e $\theta > 0$, a matriz $(H+\theta I)$ é definida positiva logo invertível, assim $\|(H+\theta I)^{-1}\| \leq \frac{1}{\theta}$. Usando este fato e lembrando que $\|\overline{x}-x\| = d(x)$, obtemos

$$
\begin{aligned}
\|x^+ - x\| &\leq \frac{L}{2\theta}d(x)^2 + d(x) + (\delta+\theta)\frac{1}{\theta}d(x) \\
&= \left(\frac{L}{2\theta}d(x) + 1 + \frac{\delta}{\theta} + 1\right)d(x) \\
&= \left(\frac{L}{2\theta}d(x) + \frac{\delta}{\theta} + 2\right)d(x).
\end{aligned}
$$

De (2.32) temos $\frac{1}{\theta} = \frac{1}{\gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma}$. Por (2.28) temos, $\frac{1}{\|\nabla f(x)\|} \leq \frac{b}{d(x)}$. Daí,

$$
\frac{1}{\theta} = \frac{1}{\gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma} \leq \frac{b^\sigma}{\gamma d(x)^\sigma},
$$

então,

$$
\|x^+ - x\| \leq \left(\frac{Lb^\sigma}{2\gamma}d(x)^{1-\sigma} + \frac{\delta b^\sigma}{\gamma d(x)^\sigma} + 2\right)d(x).
$$

Pelo lema 2.2.2 temos que $\delta \leq \beta_1 L d(x)$, assim

$$
\|x^+ - x\| \leq \left(\frac{Lb^\sigma}{2\gamma}d(x)^{1-\sigma} + \frac{\beta_1 L b^\sigma}{\gamma}d(x)^{1-\sigma} + 2\right)d(x).
$$

Usando $d(x) \leq \eta$, temos

$$
\begin{aligned}
\|x^+ - x\| &\leq \left(\frac{Lb^\sigma}{2\gamma}\eta^{1-\sigma} + \frac{\beta_1 L b^\sigma}{\gamma}\eta^{1-\sigma} + 2\right)d(x) \\
&= \left(\frac{Lb^\sigma}{2\gamma}\eta^{1-\sigma}(1+2\beta_1) + 2\right)d(x).
\end{aligned}
$$

como queríamos demonstrar. □

O próximo resultado mostra que a taxa de convergência da distância das iterações para o conjunto de soluções é super-linear.

Lema 2.2.4. *Seja* $c_2 = bc_1\left(\beta_1 L\eta^{1-\sigma}+\gamma l^{\sigma}+\frac{L}{2}c_1\eta^{1-\sigma}\right)$. *Para todo* $x \in B\left(x^*, \frac{\eta}{2(1+c_1)}\right)$ *temos*

$$d(x^+) \leq c_2 d(x)^{1+\sigma}.$$

Demonstração. Seja $x \in B\left(x^*, \frac{\eta}{2(1+c_1)}\right)$, assim $d(x) = \|x - \overline{x}\| \leq \|x - x^*\| < \frac{\eta}{2(1+c_1)}$. Pelo lema 2.2.3 e, como $c_1 > 2$ temos

$$\begin{aligned}
\|x^+ - x^*\| &= \|x^+ - x + x - x^*\| \\
&\leq \|x^+ - x\| + \|x - x^*\| \\
&\leq c_1 d(x) + \|x - x^*\| \\
&< c_1\|x - \overline{x}\| + \frac{\eta}{2(1+c_1)} \\
&< c_1\frac{\eta}{2(1+c_1)} + \frac{\eta}{2(1+c_1)} \\
&= \frac{\eta}{2},
\end{aligned}$$

segue que $x^+ \in B(x^*, \eta/2)$. Então a desigualdade (2.28) pode ser aplicado em x^+, portanto

$$d(x^+) \leq b\|\nabla f(x^+)\|.$$

Usando o corolário 1.2.2 (para ∇f) com $v = x^+ - x$ e por (2.30), temos

$$\begin{aligned}
\nabla f(x^+) &= \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(H + \theta I)(x^+ - x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(\nabla^2 f(x) + \delta I + \theta I)(x^+ - x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(\nabla^2 f(x) + (\delta + \theta)I)(x^+ - x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(\delta + \theta)I)(x^+ - x) - \nabla^2 f(x)(x^+ - x) \\
&\quad + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(\delta + \theta)I)(x^+ - x) - \int_0^1 \nabla^2 f(x)(x^+ - x)dt \\
&\quad + \int_0^1 \nabla^2 f(x + t(x^+ - x))(x^+ - x)dt \\
&= -(\delta + \theta)I(x^+ - x) + \int_0^1 (\nabla^2 f(x + t(x^+ - x)) - \nabla^2 f(x))(x^+ - x)dt.
\end{aligned}$$

Tirando a norma de ambos os lados desta igualdade, usando (2.26) e aplicando o lema 2.2.3, obtemos

$$\|\nabla f(x^+)\| \leq (\delta + \theta)\|x^+ - x\| + \frac{L}{2}\|x^+ - x\|^2 \leq (\delta + \theta)c_1 d(x) + \frac{L}{2}c_1^2 d(x)^2.$$

Do lema 2.2.2, sabemos que $\delta \leq \beta_1 L d(x)$. Pela definição de θ em (2.32) e usando (2.27), temos

$$\theta = \gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma = \gamma\|\nabla f(x) - \nabla f(\overline{x})\|^\sigma \leq \gamma(l\|x-\overline{x}\|)^\sigma = \gamma l^\sigma \|x-\overline{x}\|^\sigma = \gamma l^\sigma d(x)^\sigma.$$

Finalmente, obtemos

$$\begin{aligned} d(x^+) &\leq b\Big((\beta_1 L d(x) + \gamma l^\sigma d(x)^\sigma) c_1 d(x) + \frac{L}{2} c_1^2 d(x)^2\Big) \\ &= bc_1\Big(\beta_1 L d(x)^2 + \gamma l^\sigma d(x)^{1+\sigma} + \frac{L}{2} c_1 d(x)^2\Big) \\ &= bc_1\Big(\beta_1 L d(x)^{1-\sigma} + \gamma l^\sigma + \frac{L}{2} c_1 d(x)^{1-\sigma}\Big) d(x)^{1+\sigma} \\ &\leq bc_1\Big(\beta_1 L \eta^{1-\sigma} + \gamma l^\sigma + \frac{L}{2} c_1 \eta^{1-\sigma}\Big) d(x)^{1+\sigma}, \end{aligned}$$

e assim temos o resultado. □

Agora podemos provar que o critério de aceitação no passo 5 do algoritmo 1 é satisfeito pelo iterado x^+. Portanto, não há necessidade de chamada do algoritmo 2.

Considere $x \in \mathbb{R}^n$ e a função $\varphi_x : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definida por

$$\varphi_x(\xi) = f(\xi) + \frac{\theta}{2}\|\xi - x\|^2, \text{ onde } \theta \text{ é dado por (2.32).}$$

Note que $\varphi_x(x) = f(x)$, $\nabla\varphi_x(x) = \nabla f(x)$ e $\nabla^2\varphi_x(\xi) = \nabla^2 f(\xi) + \theta I$. Posto isto, provaremos o resultado a seguir.

Lema 2.2.5. *Seja $\rho \in (0,1)$. Existe $\varepsilon > 0$, tal que para todo $x \in B(x^*, \varepsilon)$,*

$$\varphi_x(x^+) < f(x) \text{ e } \|\nabla\varphi_x(x^+)\| \leq \rho\|\nabla f(x)\|.$$

Demonstração. Seja

$$\varepsilon = \min\left\{\frac{\eta}{2(1+c_1)}, \left(\frac{3\gamma}{Lc_1 b^\sigma}\right)^{\frac{1}{1-\sigma}}, \left(\frac{\rho}{b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1)}\right)^{\frac{1}{\sigma}}\right\}.$$

Assim, temos

$$\varepsilon \leq \frac{\eta}{2(1+c_1)}, \tag{2.33}$$

$$\varepsilon \leq \left(\frac{3\gamma}{Lc_1 b^\sigma}\right)^{\frac{1}{1-\sigma}}, \tag{2.34}$$

e

$$\varepsilon \leq \left(\frac{\rho}{b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1)}\right)^{\frac{1}{\sigma}} \tag{2.35}$$

Seja $x \in B(x^*, \varepsilon)$. Defina $d = x^+ - x$, onde x^+ é dado por (2.30). Mostraremos a primeira desigualdade. Usando a fórmula de Taylor de segunda ordem com resto integral (teorema 1.2.7) para φ_x com $v = d = x^+ - x$ e usando (2.30) temos,

$$\varphi_x(x^+) \;=\; \varphi_x(x) + \langle\nabla\varphi_x(x), d\rangle + \int_0^1 (1-t)\langle d, \nabla^2\varphi_x(x+td)d\rangle dt$$

$$
\begin{aligned}
&= f(x) + \langle \nabla f(x), d\rangle + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) + \theta I)d\rangle dt \\
&= f(x) - \langle (H+\theta I)d, d\rangle + \int_0^1 (1-t)\langle d, \nabla^2 f(x+td)d\rangle dt + \int_0^1 (1-t)\theta\|d\|^2 dt \\
&= f(x) - \langle Hd, d\rangle - \theta\|d\|^2 \\
&\quad + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x) + \nabla^2 f(x)\rangle dt + \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= f(x) - \langle Hd, d\rangle + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x)\rangle dt \\
&\quad + \int_0^1 (1-t)\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle dt - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= f(x) - \langle (\nabla^2 f(x) + \delta I)d, d\rangle + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x))d\rangle dt \\
&\quad + \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= f(x) - \langle \nabla^2 f(x)d, d\rangle - \delta\|d\|^2 + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x))d\rangle dt \\
&\quad + \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= f(x) - \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle - \delta\|d\|^2 - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&\quad + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x))d\rangle dt.
\end{aligned}
$$

Note que,

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\langle d, (H+\theta I)d\rangle &= \frac{1}{2}\langle d, Hd\rangle + \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= \frac{1}{2}\langle d, (\nabla^2 f(x) + \delta I)d\rangle + \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&= \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle + \frac{\delta}{2}\|d\|^2 + \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \\
&\leq \frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle + \delta\|d\|^2 + \frac{\theta}{2}\|d\|^2,
\end{aligned}
$$

assim, usando que H é semi-definida positiva, temos

$$
-\frac{1}{2}\langle d, \nabla^2 f(x)d\rangle - \delta\|d\|^2 - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \leq -\frac{1}{2}\langle d, Hd\rangle - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 \leq -\frac{\theta}{2}\|d\|^2.
$$

Daí e por (2.26) tem-se,

$$
\begin{aligned}
\varphi_x(x^+) &\leq f(x) - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 + \int_0^1 (1-t)\langle d, (\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x))d\rangle dt \\
&\leq f(x) - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 + \int_0^1 (1-t)\|d\|^2\|\nabla^2 f(x+td) - \nabla^2 f(x)\| dt \\
&\leq f(x) - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 + \int_0^1 (1-t)\|d\|^2 L\|x+td-x\| dt
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= f(x) - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 + \int_0^1 (t - t^2)\|d\|^3 L dt \\
&= f(x) - \frac{\theta}{2}\|d\|^2 + \frac{L}{6}\|d\|^3 \\
&= f(x) + \frac{\|d\|^2}{6}(L\|d\| - 3\theta).
\end{aligned}
$$

Por (2.28) temos, $d(x)^\sigma b^{-\sigma} \leq \|\nabla f(x)\|^\sigma$. Usando (2.32) temos

$$\theta = \gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \geq \gamma b^{-\sigma} d(x)^\sigma,$$

assim $-3\theta \leq -3\gamma b^{-\sigma} d(x)^\sigma$. Pelo lema 2.2.3 temos que $\|d\| \leq c_1 d(x)$. Segue que,

$$L\|d\| - 3\theta \leq Lc_1 d(x) - 3\gamma b^{-\sigma} d(x)^\sigma = (Lc_1 d(x)^{1-\sigma} - 3\gamma b^{-\sigma}) d(x)^\sigma.$$

Como, $d(x) = \|x - \overline{x}\| \leq \|x - x^*\| < \varepsilon$, temos

$$L\|d\| - 3\theta < (Lc_1 \varepsilon^{1-\sigma} - 3\gamma b^{-\sigma})\varepsilon^\sigma.$$

Por (2.34) temos

$$L\|d\| - 3\theta < \left\{ Lc_1 \left[\left(\frac{3\gamma}{Lc_1 b^\sigma} \right)^{\frac{1}{1-\sigma}} \right]^{1-\sigma} - 3\gamma b^{-\sigma} \right\} \varepsilon^\sigma = \left(\frac{3\gamma}{b^\sigma} - 3\gamma b^{-\sigma} \right) \varepsilon^\sigma = 0,$$

donde segue que $\varphi_x(x^+) < f(x)$, provando a primeira desigualdade.

Agora provaremos a segunda desigualdade.

No lema 2.2.2 vimos que $\overline{x} \in B(x^*, \eta)$ e no lema 2.2.4 vimos que $x^+ \in B(x^*, \eta)$. Logo $x^+, \overline{x} \in B(x^*, \eta)$ e assim podemos usar (2.27) em x^+ e $\overline{x}$.

Temos que, $\nabla\varphi_x(x^+) = \nabla f(x^+) + \theta(x^+ - x)$. Note que $x \in B(x^*, \eta)$. Então por (2.27), (2.32), lema 2.2.3 e lema 2.2.4 temos

$$
\begin{aligned}
\|\nabla\varphi_x(x^+)\| &\leq \|\nabla f(x^+)\| + \theta\|x^+ - x\| \\
&= \|\nabla f(x^+) - \nabla f(\overline{x})\| + \theta\|x^+ - x\| \\
&\leq l\|x^+ - \overline{x}\| + \gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \|x^+ - x\| \\
&= ld(x^+) + \gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \|x^+ - x\| \\
&\leq lc_2 d(x)^{1+\sigma} + c_1 d(x)\gamma\|\nabla f(x)\|^\sigma \\
&= lc_2 d(x)^{1+\sigma} + c_1 d(x)\gamma\|\nabla f(x) - \nabla f(\overline{x})\|^\sigma \\
&\leq lc_2 d(x)^{1+\sigma} + c_1 d(x)\gamma(l\|x - \overline{x}\|)^\sigma \\
&= lc_2 d(x)^{1+\sigma} + \gamma l^\sigma c_1 d(x)^{1+\sigma} \\
&= (lc_2 + \gamma l^\sigma c_1) d(x) d(x)^\sigma.
\end{aligned}
$$

De (2.28), obtemos

$$\|\nabla\varphi_x(x^+)\| \leq b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1) d(x)^\sigma \|\nabla f(x)\|.$$

Como $d(x) = \|x - \overline{x}\| \leq \|x - x^*\| < \varepsilon$, tem-se

$$\|\nabla\varphi_x(x^+)\| \leq b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1)\varepsilon^\sigma \|\nabla f(x)\|.$$

Usando (2.35) temos,

$$\|\nabla\varphi_x(x^+)\| \leq b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1) \left[\left(\frac{\rho}{b(lc_2 + \gamma l^\sigma c_1)} \right)^{\frac{1}{\sigma}} \right]^\sigma \|\nabla f(x)\| = \rho\|\nabla f(x)\|$$

como queríamos. $\square$

Agora considere uma sequência $\{x_k\}$ gerada pelo algoritmo 1. Mostraremos que se o ponto inicial x_0 é suficientemente próximo de x^*, então o algoritmo é reduzido a uma sequência de iterações no algoritmo 1 e toda sequência converge para uma solução de (1.5). A prova é baseada em ([21], lema 2.3, p.244).

Lema 2.2.6. *Seja $\varepsilon > 0$ escolhido como no lema 2.2.5. Existe $\overline{\varepsilon} > 0$ tal que se $x_0 \in B(x^*, \overline{\varepsilon})$, então para todo $k \in \mathbb{N}$, $x_k \in B(x^*, \varepsilon)$ e $x_{k+1} = x_k^+$. Além disso, a sequência $\{x_k\}$ converge para $\hat{x} \in X$.*

Demonstração. Considere $\overline{\varepsilon} = \min\left\{\dfrac{\varepsilon}{1+2c_1}, \dfrac{1}{(2c_2)^{\frac{1}{\sigma}}}\right\}$. Assim, temos

$$\overline{\varepsilon} \leq \frac{\varepsilon}{1+2c_1}, \tag{2.36}$$

e

$$\overline{\varepsilon} \leq \frac{1}{(2c_2)^{\frac{1}{\sigma}}}. \tag{2.37}$$

A prova da primeira parte é feita por indução em $k \in \mathbb{N}$. Para $k = 0$, se $x_0 \in B(x^*, \overline{\varepsilon})$ por (2.36), temos que $x_0 \in B(x^*, \varepsilon)$. Logo, pelo lema 2.2.5 temos que o passo 5 do Algoritmo 1 é satisfeito e definimos $x_1 = x_0^+$. Então pelo lema 2.2.3 e usando (2.36) temos

$$\begin{aligned}
\|x_1 - x^*\| &= \|x_0^+ - x^*\| \\
&\leq \|x_0^+ - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&\leq c_1 d(x_0) + \|x_0 - x^*\| \\
&= c_1\|x_0 - \overline{x}\| + \|x_0 - x^*\| \\
&\leq c_1\|x_0 - x^*\| + \|x_0 - x^*\| \\
&< (c_1 + 1)\overline{\varepsilon} \\
&\leq \varepsilon,
\end{aligned}$$

logo $x_1 \in B(x^*, \varepsilon)$.

Supondo agora que, para um índice diferente de zero $k \in \mathbb{N}$, $x_j \in B(x^*, \varepsilon)$ para todo $j \in \{1, 2, \ldots, k\}$. Temos,

$$\begin{aligned}
\|x_{k+1} - x^*\| &= \|x_{k+1} - x_0 + x_0 - x^*\| \\
&\leq \|x_{k+1} - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&= \|x_{k+1} - x_1 + x_1 - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&\leq \|x_{k+1} - x_1\| + \|x_1 - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&= \|x_{k+1} - x_2 + x_2 - x_1\| + \|x_1 - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&\leq \|x_{k+1} - x_2\| + \|x_2 - x_1\| + \|x_1 - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&\leq \|x_{k+1} - x_k\| + \|x_k - x_{k-1}\| + \ldots + \|x_1 - x_0\| + \|x_0 - x^*\| \\
&= \|x_0 - x^*\| + \sum_{j=0}^{k} \|x_{j+1} - x_j\|,
\end{aligned}$$

isto é,

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \|x_0 - x^*\| + \sum_{j=0}^{k} \|x_{j+1} - x_j\|. \tag{2.38}$$

Considere $j \in \{0, \ldots, k\}$. Pelo lema 2.2.5 temos $x_{j+1} = x_j^+$. E então, pelo lema 2.2.3 tem-se

$$\|x_{j+1} - x_j\| = \|x_j^+ - x_j\| \leq c_1 d(x_j). \tag{2.39}$$

Como por hipótese $x_j \in B(x^*, \varepsilon)$ para $j \in \{1, \ldots, k\}$, pelo lema 2.2.4 temos

$$d(x_j) \leq c_2 d(x_{j-1})^{1+\sigma},\ d(x_{j-1}) \leq c_2 d(x_{j-2})^{1+\sigma},\ \ldots,\ d(x_1) \leq c_2 d(x_0)^{1+\sigma}.$$

Desta recorrência, pela igualdade da proposição 1.1.1 e usando que $(1+\sigma)^j - 1 \geq j\sigma$, temos

$$\begin{aligned}
d(x_j) &= d(x_{j-1}^+) \\
&\leq c_2 d(x_{j-1})^{1+\sigma} \\
&\leq c_2 [c_2 d(x_{j-2})^{1+\sigma}]^{(1+\sigma)} \\
&= c_2 c_2^{(1+\sigma)} d(x_{j-2})^{(1+\sigma)^2} \\
&\leq c_2 c_2^{(1+\sigma)} \left[c_2 d(x_{j-3})^{1+\sigma} \right]^{(1+\sigma)^2} \\
&= c_2 c_2^{(1+\sigma)} c_2^{(1+\sigma)^2} d(x_{j-3})^{(1+\sigma)^3} \\
&\vdots \\
&\leq c_2 c_2^{(1+\sigma)} c_2^{(1+\sigma)^2} \ldots c_2^{(1+\sigma)^{j-1}} d(x_0)^{(1+\sigma)^j} \\
&= c_2^{1+(1+\sigma)+(1+\sigma)^2+\ldots+(1+\sigma)^{j-1}} d(x_0)^{(1+\sigma)^j} \\
&= c_2^{\frac{(1+\sigma)^j-1}{\sigma}} d(x_0)^{(1+\sigma)^j} \\
&= c_2^{\frac{(1+\sigma)^j-1}{\sigma}} \|x_0 - \overline{x}\|^{(1+\sigma)^j} \\
&\leq c_2^{\frac{(1+\sigma)^j-1}{\sigma}} \|x_0 - x^*\|^{(1+\sigma)^j} \\
&< c_2^{\frac{(1+\sigma)^j-1}{\sigma}} \overline{\varepsilon}^{(1+\sigma)^j} \\
&= \left(c_2^{\frac{1}{\sigma}} \overline{\varepsilon} \right)^{(1+\sigma)^j-1} \overline{\varepsilon} \\
&\leq (c_2^{\frac{1}{\sigma}} \overline{\varepsilon})^{j\sigma} \overline{\varepsilon} \\
&= (c_2 \overline{\varepsilon}^{\sigma})^j \overline{\varepsilon}.
\end{aligned}$$

Por (2.37) obtemos

$$d(x_j) < \frac{1}{2^j} \overline{\varepsilon}. \tag{2.40}$$

De (2.38), (2.39), (2.40), (1.1) e (2.36) temos

$$\begin{aligned}
\|x_{k+1} - x^*\| &< \overline{\varepsilon} + c_1 \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{2^j} \overline{\varepsilon} \\
&\leq \overline{\varepsilon} + c_1 2 \overline{\varepsilon} \\
&= (1 + 2c_1) \overline{\varepsilon} \\
&\leq \varepsilon.
\end{aligned}$$

Logo $x_{k+1} \in B(x^*, \varepsilon)$.

Agora provaremos a última parte do lema, para isso considere dois números inteiros p e q não negativos. Já mostramos que $x_k \in B(x^*, \varepsilon)$, pelo lema 2.2.5 definimos $x_{k+1} = x_k^+$, assim usando o lema 2.2.3 e (1.2) temos,

$$\begin{aligned}
\|x_{p+q} - x_p\| &= \|x_{p+q} - x_{p+1} + x_{p+1} - x_p\| \\
&\leq \|x_{p+q} - x_{p+1}\| + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&= \|x_{p+q} - x_{p+2} + x_{p+2} - x_{p+1}\| + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&\leq \|x_{p+q} - x_{p+2}\| + \|x_{p+2} - x_{p+1}\| + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&= \|x_{p+q} - x_{p+3} + x_{p+3} - x_{p+2}\| + \|x_{p+2} - x_{p+1}\| + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&\leq \|x_{p+q} - x_{p+3}\| + \|x_{p+3} - x_{p+2}\| + \|x_{p+2} - x_{p+1}\| + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&\leq \|x_{p+q} - x_{p+q-1}\| + \|x_{p+q-1} - x_{p+q-2}\| + \ldots + \|x_{p+1} - x_p\| \\
&= \sum_{k=p}^{p+q-1} \|x_{k+1} - x_k\| \\
&= \sum_{k=p}^{p+q-1} \|x_k^+ - x_k\| \\
&\leq c_1 \sum_{k=p}^{p+q-1} d(x_k) \\
&\leq c_1 \overline{\varepsilon} \sum_{k=p}^{p+q-1} \frac{1}{2^k} \\
&\leq c_1 \overline{\varepsilon} \left(\frac{1}{2^{p-1}} \right),
\end{aligned}$$

isto mostra que $\{x_k\}$ é uma sequência de Cauchy, logo existe $\hat{x} \in \mathbb{R}$ tal que $\lim_{k \to \infty} x_k = \hat{x}$, e assim de (2.40) temos

$$\|\hat{x} - \overline{x}\| = d(\hat{x}) = \lim_{k \to \infty} d(x_k) = \lim_{k \to \infty} \|x_k - \overline{x}\| = 0$$

Logo $\hat{x} \in X$. □

Agora podemos enunciar o resultado da convergência local, que é uma consequência direta dos lemas 2.2.4 e 2.2.6.

Teorema 2.2.3. *Considere as hipóteses **H1** e **H2**. Suponha também que o Algoritmo 1 gera uma sequência $\{x_k\}$ infinita. Existe $\varepsilon' > 0$ tal que se em uma iteração k_0, $x_{k_0} \in B(x^*, \varepsilon')$, então para todo $k \geq k_0$, $x_{k+1} = x_k^+$ e $\{x_k\}$ converge super-linearmente para uma solução de (1) com uma taxa $1 + \sigma$.*

Demonstração. Basta tomar $\varepsilon' = \min \left\{ \dfrac{\eta}{2(1 + c_1)}, \overline{\varepsilon} \right\}$, onde $\overline{\varepsilon}$ dado como no lema 2.2.6 e o resultado segue diretamente dos lemas 2.2.4 e 2.2.6. □

Capítulo 3

Ilustrações numéricas do Algoritmo

Neste capítulo fazemos ilustrações numéricas que nos permitam verificar a validade e o funcionamento do Algoritmo estudado nesta dissertação.

Exemplo 4. *Vamos considerar a função* $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ *e o problema de otimização irrestrita.*

$$\min_{(x_1,x_2)\in\mathbb{R}^2} f(x_1,x_2) = x_1^4 + x_1x_2 + (1+x_2)^2.$$

Vamos considerar a solução deste problema $\overline{x} = (0.7, -1.35)$. *Adotemos como ponto inicial* $x_0 = (0,0)$. *Temos que*

$$\nabla f(x_1,x_2) = (4x_1^3 + x_2, x_1 + 2x_2 + 2), \text{ e assim } \nabla^2 f(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} 12x_1^2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

então $\nabla f(x_0) = (0,2)$ *e* $\nabla^2 f(x_0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. *Os autovalores da matriz* $\nabla^2 f(x_0)$ *são* $\lambda_1 = 1 + \sqrt{2} > 0$ *e* $\lambda_2 = 1 - \sqrt{2} < 0$ *e portanto* $\nabla^2 f(x_0)$ *é indefinida, logo o método de Newton não se aplica para* $x_0 = (0,0)$.

Vamos considerar as seguintes constantes,

$$l = 1, \quad \rho = \frac{1}{3}, \quad \gamma = 2, \quad \sigma = \frac{1}{2}, \quad \overline{\theta} = 1,$$

e o ponto inicial $x_0 = (0,0)$.

ALGORITMO 1

Passo 1: $\nabla f(x_0) = (0,2) \neq (0,0)$.
Passo 2: *Escolha* $\delta_0 = \dfrac{1}{2}$ *e assim temos que os autovalores da matriz*

$$H_0 = \nabla^2 f(x_0) + \delta_0 I = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 \\ 1 & \frac{5}{2} \end{pmatrix},$$

são positivos, logo $H_0 \succeq 0$. *Agora* $\theta_0 = \min\{2\|\nabla f(x_0)\|^{\frac{1}{2}}, 1\} = \min\{2\sqrt{2}, 1\} = 1$.
Passo 3: *vamos obter* $x_0^+ = (x,y)$, *temos*

$$(H_0 + \theta_0 I)(x_0^+ - x_0) = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 1 \\ 1 & \frac{7}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\nabla f(x_0) = -\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix},$$

que nos dá $x = \dfrac{8}{17}$ *e* $y = -\dfrac{12}{17}$, *logo* $x_0^+ = \left(\dfrac{8}{17}, -\dfrac{12}{17}\right)$.

Passo 4: $l_0 = \max\{0, 0-1\} = 0$, $l_0 = 0 = i = k$ *e* $\varepsilon_0 = \dfrac{1}{3}\|\nabla f(x_0)\| = \dfrac{2}{3}$.

Passo 5:

$$\begin{aligned}
\varphi_0(x_0^+) &= f(x_0^+) + \frac{\theta_0}{2}\|x_0^+ - x_0\|^2 \\
&= f(x_0^+) + \frac{\|x_0^+\|^2}{2} \\
&= \left(\frac{8}{17}\right)^4 + \frac{8}{17}\left(-\frac{12}{17}\right) + \left(1 - \frac{12}{17}\right)^2 + \frac{\|(\frac{8}{17}, -\frac{12}{17})\|^2}{2} \\
&= 0,16 < 1 = f(x_0),
\end{aligned}$$

e assim a primeira desigualdade do passo 5 do Algoritmo 1 é satisfeita.

$$\begin{aligned}
\|\nabla\varphi_0(x_0^+)\| &= \|\nabla f(x_0^+) + \theta_0(x_0^+ - x_0)\| \\
&= \|\nabla f(x_0^+) + x_0^+\| \\
&= \left\|\left(4\left(\frac{8}{17}\right)^3 - \frac{12}{17} + \frac{8}{17}, \frac{8}{17} - \frac{24}{17} + 2 - \frac{12}{17}\right)\right\| \\
&= 4913 > \frac{2}{3} = \varepsilon_0,
\end{aligned}$$

logo a segunda desigualdade do passo 5 do Algoritmo 1 não é satisfeita. E portanto o Algoritmo 2 é chamado.

Para o algoritmo 2 escolhemos o ponto inicial $x_{0,0} = (0, -1)$ *já que*

$$\varphi_0(x_{0,0}) = f(x_{0,0}) + \frac{\theta_0}{2}\|x_{0,0} - x_0\|^2 = \frac{1}{2} < 1 = f(x_0)$$

ALGORITMO 2

Passo 1: *Já sabemos que* $\varphi_0(x_{0,0}) = \dfrac{1}{2} < 1 = f(x_0)$, *logo a primeira desigualdade do passo 1 do Algoritmo 2 é satisfeita. Agora*

$$\begin{aligned}
\|\nabla\varphi_0(x_{0,0})\| &= \|\nabla f(x_{0,0}) + \theta_0(x_{0,0} - x_0)\| \\
&= \|\nabla f(x_{0,0}) + x_{0,0}\| \\
&= \|(-1, 0) + (0, -1)\| \\
&= \|(-1, -1)\| \\
&= \sqrt{2} > \frac{2}{3} = \varepsilon_0,
\end{aligned}$$

e assim a segunda desigualdade do passo 1 do Algoritmo 2 não é satisfeita. Então vamos ao,

Passo 2: *Como* $\nabla^2 f(x_{0,0}) = \nabla^2 f(x_0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, *podemos escolher* $\delta_{0,0} = \delta_0 = \dfrac{1}{2}$, *e portanto* $H_{0,0} = H_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 \\ 1 & \frac{5}{2} \end{pmatrix} \succeq 0$.

Passo 3: *Determinar* $d_{0,0} = (x, y)$,

$$(H_{0,0} + \theta_0 I)d_{0,0} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 1 \\ 1 & \frac{7}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\nabla\varphi_0(x_{0,0}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

daí tem-se, $x = \dfrac{10}{17}$ *e* $y = \dfrac{2}{17}$ *e então* $d_{0,0} = \left(\dfrac{10}{17}, \dfrac{2}{17}\right)$. *Observe que a partir de* $x_{0,0}, d_{0,0}$ *é uma direção de descida para* φ_0.

Passo 4: $\alpha_{0,0} = 1$, *considere* $\omega = \dfrac{1}{4}, \tau = 0.8$. *Temos que,* $x_{0,0} + \alpha_{0,0} d_{0,0} = \left(\dfrac{10}{17}, -\dfrac{15}{17}\right)$. *Então*

$$\begin{aligned}\varphi_0(x_{0,0} + \alpha_{0,0} d_{0,0}) &= \varphi_0\left(\frac{10}{17}, -\frac{15}{17}\right)\\ &= f\left(\frac{10}{17}, -\frac{15}{17}\right) + \frac{1}{2}\left\|\left(\frac{10}{17}, -\frac{15}{17}\right)\right\|^2\\ &= 0,16,\end{aligned}$$

e

$$\varphi_0(x_{0,0}) + \omega\alpha_{0,0}\langle\nabla\varphi_0(x_{0,0}), d_{0,0}\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left\langle\left(-1, -1\right), \left(\frac{10}{17}, \frac{2}{17}\right)\right\rangle = \frac{1}{2} - \frac{12}{68} = 0,32,$$

logo

$$\varphi_0(x_{0,0} + \alpha_{0,0} d_{0,0}) = 0,16 < 0,32 = \varphi_0(x_{0,0}) + \omega\alpha_{0,0}\langle\nabla\varphi_0(x_{0,0}), d_{0,0}\rangle,$$

e desse modo definimos, $x_{0,1} = x_{0,0} + \alpha_{0,0} d_{0,0} = \left(\dfrac{10}{17}, -\dfrac{15}{17}\right)$, *e retornamos ao passo 1 do Algoritmo 2.*

Passo 1: *Temos,* $\varphi_0(x_{0,1}) = \varphi_0\left(\dfrac{10}{17}, -\dfrac{15}{17}\right) = 0,16 < 1 = f(x_0)$, *o que significa que a primeira desigualdade do Algoritmo 2 é satisfeita.*

$$\begin{aligned}\|\varphi_0(x_{0,1})\| &= \|\nabla f(x_{0,1}) + \theta_0(x_{0,1} - x_0)\|\\ &= \|\nabla f(x_{0,1}) + x_{0,1}\|\\ &= \left\|\left(4\left(\frac{10}{17}\right)^3 - \frac{15}{17}, \frac{10}{17} - \frac{30}{17} + 2\right) + \left(\frac{10}{17}, -\frac{15}{17}\right)\right\|\\ &= \left\|\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{17}\right)\right\| = \frac{1}{2} < \frac{2}{3} = \varepsilon_0,\end{aligned}$$

isto nos diz que, a segunda desigualdade do Algoritmo 2 também é satisfeita e então definimos $x_1 = x_{0,1} = \left(\dfrac{10}{17}, -\dfrac{15}{17}\right)$ *e retornamos ao Algoritmo 1.*

ALGORITMO 1

Passo 1: *Sendo* $x_1 = \left(\dfrac{10}{17}, -\dfrac{15}{17}\right)$ *temos que,*

$$\nabla f(x_1) = \left(4\left(\frac{10^3}{17}\right) - \frac{15}{17}, 10 - \frac{30}{17} + 2\right) = (-0.07, 0.8) \neq (0,0).$$

Passo 2: *Como os autovalores da matriz* $\nabla^2 f(x_1) = \begin{pmatrix} 12(\frac{10}{17})^2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, *são positivos podemos escolher* $\delta_1 = 0$, *o que nos dá* $H_1 = \nabla^2 f(x_1) = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \succeq 0.$

E ainda, $\theta_1 = \min\{2\|\nabla f(x_1)\|^{\frac{1}{2}}, 1\} = \min\{1.8, 1\} = 1.$
Passo 3: *Encontrar* $x_1^+ = (x, y)$,

$$(H_1 + \theta_1 I)(x_1^+ - x_1) = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - \frac{10}{17} \\ \\ y + \frac{15}{17} \end{pmatrix} = -\nabla f(x_1) = \begin{pmatrix} 0.07 \\ -0.8 \end{pmatrix},$$

de onde obtemos $x = 0.66$ *e* $y = -1.18$, *logo* $x_1^+ = (0.66, -1.18)$.
Passo 4: $l_1 = \max\{0, 1-1\} = 0$, $l_1 = 0 \leq i \leq 1 = k$ *e assim*

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{3}\max\{\|\nabla f(x_0)\|, \|\nabla f(x_1)\|\} = \frac{1}{3}\max\{\|(0,2)\|, \|(0.07, 0.8)\|\} = \frac{1}{3}\max\{2, 0.8\} = \frac{2}{3}.$$

Passo 5:

$$\begin{aligned}
\varphi_1(x_1^+) &= f(x_1^+) + \frac{\theta_1}{2}\|x_1^+ - x_1\|^2 \\
&= (0.66)^4 - (0.66)(1.18) + (1 - 1.8)^2 + \frac{1}{2}\left\|\left(0.66 - \frac{10}{17}, -1.18 + \frac{15}{17}\right)\right\|^2 \\
&= -0.41,
\end{aligned}$$

e

$$f(x_1) = \left(\frac{10}{17}\right)^4 - \frac{150}{(17)^2} + \left(1 - \frac{15}{17}\right)^2 = -0.38.$$

Logo $\varphi_1(x_1^+) = -0.41 < -0.38 = f(x_1)$ *portanto a primeira desigualdade do passo 5 é satisfeita.*

$$\begin{aligned}
\|\nabla\varphi_1(x_1^+)\| &= \|\nabla f(x_1^+) + \theta_1(x_1^+ - x_1)\| \\
&= \left\|\left(4(0.66)^3 - 1.18, 0.66 - 2 \times 1.18 + 2\right) + \left(0.66 - \frac{10}{17}, -1.18 + \frac{15}{17}\right)\right\| \\
&= \|(-0.03, 0.3) + (0.08, -0.3)\| \\
&= \|(0.05, 0)\| \\
&= 0.05 < \frac{2}{3} = \varepsilon_1,
\end{aligned}$$

e portanto a segunda desigualdade do passo 5 também é satisfeita. Então definimos $x_2 = x_1^+ = (0.66, -1.18)$.

Observe que $x_2 = (0.66, -1.18) \approxeq (0.7, -1.35)$ *e*

$$\nabla f(x_2) = (4(0.66)^3 - 1.18, 0.66 - 2 \times 1.18 + 2) = (-0.03, 0.3) \approxeq (0, 0),$$

e ainda a matriz $\nabla^2 f(x_2) = \begin{pmatrix} 12(0.66)^2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ *é definida positiva.*

Exemplo 5. *Agora considere o seguinte problema*

$$\min_{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2} f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2.$$

Este problema possui uma única solução $\overline{x} = (2, 1)$. Vamos verificar que a sequência gerada pelo algoritmo esta convergindo para a solução deste problema. Nesta experiência consideramos as constantes,

$$l = 0,\ \rho = \frac{1}{2},\ \gamma = 1,\ \sigma = \frac{1}{2},\ \overline{\theta} = 2.$$

Temos que $\nabla f(x_1, x_2) = (x_1 - 2, 2x_2 - 2)$ *e ainda a matriz* $\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$.

ALGORITMO 1

Passo 1: $\nabla f(x_0) = (-1, -2) \neq (0, 0)$.

Passo 2: *como* $\nabla^2 f(x_0) = \nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *é definida positiva escolhemos* $\delta_0 = 0$, *assim* $H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *e* $\theta_0 = \min\{\|\nabla f(x_0)\|^{\frac{1}{2}}, 2\} = \min\{(\sqrt{5})^{\frac{1}{2}}, 2\} = \frac{3}{2}$.

Passo 3: *vamos obter* $x_0^+ = (x, y)$, *temos*

$$(H_0 + \theta_0 I)(x_0^+ - x_0) = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & \frac{7}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - 1 \\ y \end{pmatrix} = -\nabla f(x_0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Resolvendo este sistema obtemos $x_0^+ = (\frac{7}{5}, \frac{4}{7})$.

Passo 4: $l_0 = \max\{0, 0 - 0\} = 0,\ \varepsilon_0 = \frac{1}{2}\|\nabla f(x_0)\| = \frac{\sqrt{5}}{2}$.

Passo 5:

$$\begin{aligned} \varphi_0(x_0^+) &= f(x_0^+) + \theta_0 \|x_0^+ - x_0\| \\ &= \frac{1}{2}\Big(\frac{7}{5} - 2\Big)^2 + \Big(\frac{4}{7} - 1\Big)^2 + \frac{3}{2}\Big[\Big(\frac{7}{5} - 1\Big)^2 + \Big(\frac{4}{7}\Big)^2\Big] \\ &= 1.09, \end{aligned}$$

então

$$f(x_0) = \frac{1}{2}(1 - 2)^2 + (-1)^2 = \frac{3}{2} = 1,5 > \varphi_0(x_0^+).$$

Agora

$$\begin{aligned} \|\nabla \varphi_0(x_0^+)\| &= \|\nabla f(x_0^+) + \theta_0(x_0^+ - x_0)\| \\ &= \Big\|\Big(\frac{7}{5} - 2, 2.\frac{4}{7} - 2\Big) + \frac{3}{2}\Big(\frac{7}{5} - 1, \frac{4}{7}\Big)\Big\| \\ &= 0, \end{aligned}$$

portanto

$$\varepsilon_0 = \frac{\sqrt{5}}{2} > 0 = \|\nabla \varphi_0(x_0^+)\|$$

logo definimos $x_1 = x_0^+ = (\frac{7}{5}, \frac{4}{7})$ *e retornamos ao passo 1.*

ALGORITMO 1

Passo 1:

$$\nabla f(x_1) = \left(\frac{7}{5} - 2, 2\frac{4}{7} - 2\right) = \left(-\frac{3}{5}, -\frac{6}{7}\right) = (-0.6, -0.85) \neq (0,0).$$

Passo 2: *como* $\nabla^2 f(x_1) = \nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *é definida positiva escolhemos* $\delta_1 = 0$ *e assim* $H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *e,*

$$\theta_1 = \min\{\|\nabla f(x_1)\|^{\frac{1}{2}}, 2\} = \min\left\{\left(\sqrt{\frac{9}{25} + \frac{36}{49}}\right)^{\frac{1}{2}}, 2\right\} = \min\{1.02, 2\} = 1.02.$$

Passo 3: *vamos obter* $x_1^+ = (x, y)$, *temos*

$$(H_1 + \theta_1 I)(x_1^+ - x_1) = \begin{pmatrix} 2.02 & 0 \\ 0 & 3.02 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - \frac{7}{5} \\ y - \frac{4}{7} \end{pmatrix} = -\nabla f(x_1) = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ \\ \frac{6}{7} \end{pmatrix}.$$

Resolvendo este sistema obtemos $x_1^+ = (1.69, 0.85)$.

Passo 4: $l_1 = \max\{0, 1 - 0\} = 1$, $\varepsilon_1 = \frac{1}{2}\|\nabla f(x_1)\| = \dfrac{1}{2}\sqrt{\frac{9}{25} + \frac{36}{49}} = 0.52$.

Passo 5:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_1^+) &= f(x_1^+) + \theta_1 \|x_1^+ - x_1\| \\ &= \frac{1}{2}(1.69 - 2)^2 + (0.85 - 1)^2 + 1.02\left[\left(1.69 - \frac{7}{5}\right)^2 + \left(0.85 - \frac{4}{7}\right)^2\right] \\ &= 0.21, \end{aligned}$$

agora

$$f(x_1) = \frac{1}{2}\left(\frac{7}{5} - 2\right)^2 + \left(\frac{4}{7} - 1\right)^2 = 0.26 > 0.21 = \varphi_1(x_1^+).$$

E ainda

$$\begin{aligned} \|\nabla \varphi_1(x_1^+)\| &= \|\nabla f(x_1^+) + \theta_1(x_1^+ - x_1)\| \\ &= \left\|(1.69 - 2, 2 \times 0.85 - 2) + 1.02\left(1.69 - \frac{7}{5}, 0.85 - \frac{4}{7}\right)\right\| \\ &= \|(-0.01, -0.02)\| \\ &= 0.0223, \end{aligned}$$

então

$$\varepsilon_1 = 0.52 > 0,0223 = \|\nabla \varphi_1(x_1^+)\|$$

por tanto definimos $x_2 = x_1^+ = (1.69, 0.85)$ *e novamente retornamos ao passo 1.*

ALGORITMO 1

Passo 1:

$$\nabla f(x_2) = (1.69 - 2, 2 \times 0.85 - 2) = (-0.31, -0.3) \neq (0,0).$$

Passo 2: *como* $\nabla^2 f(x_2) = \nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *é definida positiva escolhemos* $\delta_2 = 0$ *e assim* $H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ *e,*

$$\theta_2 = \min\{\|\nabla f(x_2)\|^{\frac{1}{2}}, 2\} = \min\left\{\left(\sqrt{(-0,31)^2 + (-0.3)^2}\right)^{\frac{1}{2}}, 2\right\} = \min\{0.65, 2\} = 0.65.$$

Passo 3: *vamos obter* $x_2^+ = (x, y)$*, temos*

$$(H_2 + \theta_2 I)(x_2^+ - x_2) = \begin{pmatrix} 1.65 & 0 \\ 0 & 2.65 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x - 1.69 \\ y - 0.85 \end{pmatrix} = -\nabla f(x_2) = \begin{pmatrix} 0.31 \\ 0.3 \end{pmatrix}.$$

Resolvendo este sistema obtemos $x_2^+ = (1.88, 0.96)$.
Passo 4: $l_2 = \max\{0, 2 - 0\} = 2$, $\varepsilon_2 = \frac{1}{2}\|\nabla f(x_2)\| = \dfrac{1}{2}\sqrt{(-0.31)^2 + (-0.3)^2} = 0.21.$
Passo 5:

$$\begin{aligned} \varphi_2(x_2^+) &= f(x_2^+) + \theta_2 \|x_2^+ - x_2\| \\ &= \frac{1}{2}(1.88 - 2)^2 + (0.96 - 1)^2 + 0.65[(1.88 - 1.69)^2 + (0.96 - 0.85)^2] \\ &= 0.04, \end{aligned}$$

e temos

$$f(x_2) = \frac{1}{2}(1.69 - 2)^2 + (0.85 - 1)^2 = 0.07 > 0.04 = \varphi_2(x_2^+).$$

E ainda

$$\begin{aligned} \|\nabla \varphi_2(x_2^+)\| &= \|\nabla f(x_2^+) + \theta_2(x_2^+ - x_2)\| \\ &= \|(1.88 - 2, 2 \times 0.96 - 2) + 0.65(1.88 - 1.69, 0.96 - 0.85)\| \\ &= \|(0.003, -0.01)\| \\ &= 0.010, \end{aligned}$$

então

$$\varepsilon_1 = 0.21 > 0.010 = \|\nabla \varphi_1(x_1^+)\|,$$

por tanto definimos $x_3 = x_2^+ = (1.88, 0.96)$.
note que $x_3 = (1.88, 0.96) \approxeq \overline{x} = (2, 1)$ *ou seja, estamos nos aproximando da solução do problema dado.*

Capítulo 4

Considerações finais

Nesta dissertação apresentamos um algoritmo proposto em [1] para resolver problemas de otimização irrestrita da forma

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

sob a hipótese de que função objetivo $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é duas vezes continuamente diferenciável e limitada inferiormente e, a partir dai foi estabelecida a convergência global do algoritmo. A hipótese de f ser limitada inferiormente foi essencial para garantir que em cada iteração i do algoritmo 2 exista (pelo menos) um ponto $x_{k,i} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\varphi_k(x_{k,i}) \leq f(x_k)$, onde tal ponto pode ser obtido resolvendo o problema proximal (6). Além, disso com a condição de margem de erro local no gradiente da função f e outras hipóteses comuns em análise de algoritmos, demonstramos a convergência local do algoritmo com taxa de convergência super-linear. Por tanto, a boa definição do algoritmo foi estabelecida e verificamos que a sequência gerada pelo algoritmo converge para uma solução do problema acima.

O método ponto proximal clássico exige a convexidade da função objetivo f, e percebemos que esta hipótese não foi empregada neste contexto. Como perspectivas de trabalhos futuros podemos nos questionar se:

(1) A hipótese de convexidade sobre f pode melhorar a taxa de convergência do algoritmo?;

(2) Uma vez que toda função $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ de classe C^2 tem uma representação DC, sendo f duas vezes continuamente diferenciável, podemos aplicar o algoritmo estudado nesta dissertação para uma classe de funções que podem ser escrita como diferença entre duas funções convexas? Tais funções são chamadas de funções DC. Apesar de não haver uma representação geral, as funções DC são bastante úteis por exemplo na economia e na engenharia.

Terminamos esta dissertação fazendo ilustrações numéricas que nos possibilitam verificar a validade do algoritmo proposto. O algoritmo surge como uma proposta de método que possui boas propriedades de convergência sob hipóteses razoáveis, e que computacionalmente pode se mostrar mais eficiente que outros métodos já existentes para resolver problemas de otimização irrestrita.

Referências Bibliográficas

[1] ARMAND, P., LANKOANDÉ, I.*An inexact proximal regularization method for unconstrained optimization* . Math. Meth. Oper. Res. v.85, p.43-59, 2017.

[2] ARMAND P, BENOIST J, OMHENI R, PATELOUP V. *Study of a primal-dual algorithm for equality constrained minimization.* Comput Optim Appl. v.59, n.3, p.405–433. 2014.

[3] ARMAND P, BENOIST J, ORBAN D. *From global to local convergence of interior methods for nonlinear optimization.* Optim Methods Softw. v.28, n.5, p.1051–1080. 2013.

[4] ARMAND P, OMHENI R. *A globally and quadratically convergent primal-dual augmented lagrangian algorithm for equality constrained optimization.* Optim Methods Softw. Junho. 2015.

[5] B. MARTINET. *Regularisation dinéquations variationelles par approximations successives.* Rev. Française d'Auto. Inform. Rech. Opér. p.154–158. 1970.

[6] BYRD, R.H.; NOCEDAL, J. *A tool for the analysis of quasi-Newton methods with application to unconstrained minimization.* SIAM J. Numer. Anal. v.26,n.3, p.727–739. Junho. 1989.

[7] HUMES C JR, SILVA PJS. *Inexact proximal point algorithms and descent methods in optimization.* Optim Eng, v.6, n.2, p.257–271. 2005

[8] IUSEM, A.N., *Proximal Point Methods in Optimization*, 20º Colóquio Brasileiro de Matemática. Rio de Janeiro: IMPA, 1995.

[9] IZMAILOV, A.; SOLODOV, M., *Otimização: Condições de Otimalidade, Elementos de Análise Conexa e de Dualidade*, vol.1, 3.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.

[10] IZMAILOV, A.; SOLODOV, M., *Otimização: Métodos Computacionais*, vol.2, 2.ed. Rio de Janeiro, 2012.

[11] LIMA,E. L.,*Curso de Análise*, vol.1, 12.ed. Rio de Janeiro: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 2010.

[12] LIMA, E. L., *Curso de análise*, vol.2, 11.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2015.

[13] LIMA, E. L., *Análise Real: Funções de n Variáveis*, vol.2, 6.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2013.

[14] LIMA, E. L., *Análise no Espaço* $\mathbb{R}^n$, 2.ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2013.

[15] Ribeiro, A.R.; Karas, E.W., *Otimização Contínua: Aspectos Teóricos e Computacionais*, São Paulo: Cengage Learning, 2013.

[16] R.T. Rockafellar, *Augmented Lagrangians and applications of the proximal point algorithm in convex programming*, Mathematics of Operations Research, p.97–116. 1976.

[17] R.T. Rockafellar, *Monotone operators and the proximal point algorithm*, SIAM J. Control, p.877–898. 1976.

[18] Santos SA, Silva RCM , *An inexact and nonmonotone proximal method for smooth unconstrained minimization*. J Comput Appl Math, p.86–100. 2014.

[19] Ueda, K., Yamashita, N.: *Convergence properties of the regularized Newton method for the unconstrained nonconvex optimization*. Appl. Math. Optim, v.62, n.1, p.27–46. 2010.

[20] Ueda K, Yamashita N *A regularized Newton method without line search for unconstrained optimization*. Comput Optim Appl, v.59, n.(1–2), p.321–351. 2014.

[21] Yamashita, N., Fukushima, M., *On the rate of convergence of the Levenberg-Marquardt method*. In: Topics in numerical analysis, Comput. Suppl., vol. 15, p. 239–249. Springer, Vienna. 2001.