

# UM ESTUDO NUMÉRICO DO MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS PARA AS BUSCAS DE ARMIJO E GOLDSTEIN

Giselle Lopes da Cruz<sup>1</sup>, Márcio Antônio de A. Bortoloti<sup>2</sup>, Wéllington Moutinho Dias<sup>3</sup>

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, BA, Brasil

giselle.lcz@gmail.com<sup>1</sup>, mbortoloti@uesb.edu.br<sup>2</sup>, wellingtonmoutinhodias@gmail.com<sup>3</sup>

## Resumo

O Método dos Gradientes Conjugados é uma alternativa que melhora a eficiência na determinação de minimizadores de funções quando comparado com o Método do Gradiente. Neste trabalho, apresentamos um estudo computacional comparando os métodos citados quando equipados com as buscas lineares de Armijo e de Goldstein. *Performance profiles* são apresentados para mostrar o comportamento dos métodos na minimização de uma função teste.

**Palavras-Chave:** Busca de Armijo; Busca de Goldstein; Método dos Gradientes Conjugados.

## Introdução

Existem vários métodos disponíveis na literatura para a minimização de funções. Conhecido como Método de Cauchy, o Método do Gradiente (MG) é um método de primeira ordem que tem sido bastante empregado nessas situações. Um outro método de primeira ordem presente na bibliografia, que possui características mais interessantes que o MG no que diz respeito a convergência, é o Método dos Gradientes Conjugados (MGC). Como exemplo, para o caso de minimização de funções quadráticas, o MGC resolve esse tipo de problema em uma quantidade finita de passos. Para garantir que esses métodos sejam eficientes, é necessário que o comprimento de passo, tomado na direção descida, garanta o decréscimo da função objetivo. Neste trabalho, analisamos o desempenho das buscas de Armijo e de Goldstein quando utilizadas no MG e no MGC. Para um  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $\rho \in (0, 1)$  e uma direção de descida  $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ , a busca de Armijo consiste em determinar um  $\alpha > 0$  tal que

$$f(x + \alpha d) \leq f(x) + \rho \alpha \nabla f(x)^\top d. \quad (1)$$

Tal busca pode fornecer comprimentos de passo muito pequenos, o que pode tornar um método mais lento. Para evitar essa situação, pode-se utilizar a busca de Goldstein, que consiste em determinar um  $\alpha > 0$ , com  $0 < \rho_1 < \rho_2 < 1$ , tal que

$$f(x) + \rho_2 \alpha \nabla f(x)^\top d \leq f(x + \alpha d) \leq f(x) + \rho_1 \alpha \nabla f(x)^\top d. \quad (2)$$

Neste estudo, apresentamos um estudo numérico comparando o MG com o MGC, equipados com as buscas de Armijo e de Goldstein, para a minimização da função  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , dada em [3], tal que

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n/4} [(x_{4i-3} + 10x_{4i-2})^2 + 5(x_{4i-1} - x_{4i})^2 + (x_{4i-2} - 2x_{4i-1})^4 + 10(x_{4i-3} - x_{4i})^4].$$

## Desenvolvimento e Metodologia

O Método dos Gradientes Conjugados é apresentado no algoritmo abaixo. A partir desta seção, consideraremos  $g_k = \nabla f(x_k)$ .

### Algoritmo 1: MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS

1 Dados:  $\rho \in (0, 1)$ ,  $0 < \rho_1 < \rho_2 < 1$ ,  $\epsilon > 0$ ,  $\epsilon_1 > 0$  e  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ .

2 Faça:  $k := 0$ .

3 Repita enquanto  $\|g_k\| \geq \epsilon$ .

4 Tome

$$d_k := \begin{cases} -g_k + \beta_k d_{k-1}, & \text{se } d_{k-1}^\top (g_k - g_{k-1}) \geq \epsilon_1 \|d_{k-1}\| \|g_{k-1}\|, \\ -g_k, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

5 Encontre um  $\alpha_k$  por meio de uma busca linear.

6  $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$ .

7  $k \leftarrow k + 1$ .

Conforme as fontes de referências científicas, existem diversas formas de se definir um

valor para  $\beta_k$ . Aqui, tomamos  $\beta_k = \|g_k\|^2 / (d_{k-1}^\top (g_k - g_{k-1}))$ , de acordo com [4]. Gostaríamos de observar que, se tomarmos  $d_k = -g_k$  e  $\beta_k = 0 \forall k \in \mathbb{N}$ , o algoritmo se reduz ao MG. Observamos também que o Método dos Gradientes Conjugados, equipado com a busca de Goldstein, utiliza a direção do gradiente somente para  $k = 0$ , evitando a execução do teste para a escolha da direção nas outras iteradas, veja passo 4 do algoritmo. As propriedades de convergência do Método do Gradiente equipado com a busca de Armijo (MGA) e com a busca de Goldstein (MGG) são encontradas em [2]. O Método dos Gradientes Conjugados, equipado com a busca de Armijo (MGCA), tem suas propriedades de convergência apresentadas em [4]. Já com a busca de Goldstein (MGCG), as propriedades são analisadas em [1].

## Resultados Numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos obtidos para a minimização da função  $f$  definida anteriormente. O Algoritmo 1 foi implementado na linguagem de programação Julia. Os códigos utilizados estão livremente disponibilizados em <https://github.com/petimatematica/conjugategradient>. Nos testes, consideramos  $\epsilon = 10^{-5}$ ,  $\epsilon_1 = 0.01$ ,  $\rho = 0.1$ ,  $\rho_1 = 10^{-4}$  e  $\rho_2 = 1 - \rho_1$ . O algoritmo foi parado quando a norma do gradiente atingiu a tolerância estabelecida ou quando o número máximo de 500000 iteradas foi excedido. Tomamos as dimensões  $n = 100, 104, 108, \dots, 500$ . Para cada dimensão, consideramos um chute inicial dado por  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , onde  $x_0 = rand(n)$ , totalizando 101 problemas testados. Na Figura 1, podemos observar que todos os métodos resolveram todos os problemas, entretanto, o MGA e o MGG utilizaram uma quantidade muito maior de iteradas do que os métodos MGCA e o MGCG. Gostaríamos de observar que o baixo desempenho em termos do número de interações dos métodos MGA e MGG foi devido à ocorrência de comprimentos de passo muito pequenos. Além do mais, observamos na Figura 2 que o MGCA teve um melhor desempenho em relação ao MGCG no que diz respeito ao tempo de execução.

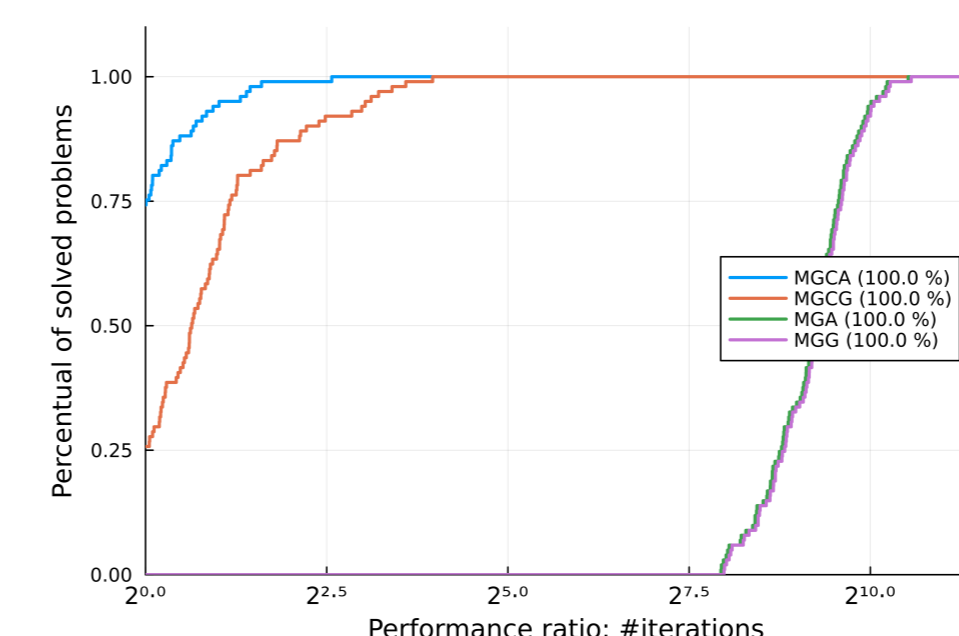


Figura 1: Performance profile relativo às iterações.

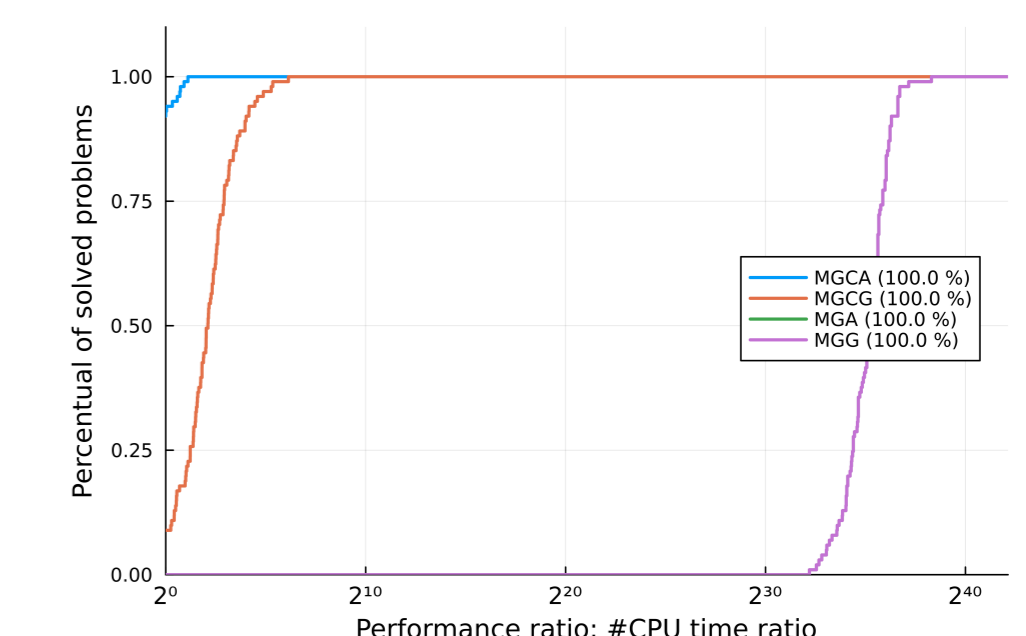


Figura 2: Performance profile relativo ao tempo de CPU.

## Referências

- [1] Dai, Y. & Yuan, Y. Some properties of a new conjugate gradient method. *Advances In Nonlinear Programming: Proceedings Of The 96 International Conference On Nonlinear Programming*. pp. 251-262 (1998)
- [2] Nocedal, J. & Wright, S. Numerical optimization. (Springer, 1999)
- [3] Surjanovic, S. & Bingham, D. Virtual Library of Simulation Experiments: Test Functions and Datasets. (Retrieved September 4, 2023, from <http://www.sfu.ca/~ssurjano/optimization.html>)
- [4] Zhang, L., Zhou, W. & Li, D. Global convergence of the DY conjugate gradient method with Armijo line search for unconstrained optimization problems. *Optimization Methods And Software*. **22**, 511-517 (2007)

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao Programa de Educação Tutorial Institucional da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (PETI/UESB) pelas bolsas de estudo e à UESB pelo apoio financeiro na hospedagem e na alimentação.