

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica

GABRIEL BELÉM BARBOSA

Minimização de problemas compósitos com regularizações descontínuas

Campinas 2025 Gabriel Belém Barbosa

Minimização de problemas compósitos com regularizações descontínuas

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Paulo José da Silva e Silva

Este trabalho corresponde à versão final da Dissertação defendida pelo aluno Gabriel Belém Barbosa e orientada pelo Prof. Dr. Paulo José da Silva e Silva.

> Campinas 2025

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica Ana Regina Machado - CRB 8/5467

Barbosa, Gabriel Belém, 2000-

B234m Minimização de problemas compósitos com regularizações descontínuas / Gabriel Belém Barbosa. – Campinas, SP : [s.n.], 2025.

Orientador: Paulo José da Silva e Silva. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Otimização compósita. 2. Método de gradiente proximal. 3. Esparsidade de grupos. I. Silva, Paulo José da Silva e, 1973-. II. Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Informações complementares

Título em outro idioma: Composite minimization with discontinuous regularizations **Palavras-chave em inglês:**

Composite optimization Proximal gradient method Group sparsity **Área de concentração:** Matemática Aplicada **Titulação:** Mestre em Matemática Aplicada **Banca examinadora:** Paulo José da Silva e Silva [Orientador] Roberto Andreani Maicon Marques Alves **Data de defesa:** 14-02-2025 **Programa de Pós-Graduação:** Matemática Aplicada

Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) ODS: 9. Inovação e infraestrutura

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a) - ORCID do autor: https://orcid.org/0009-0000-4204-8326 - Currículo Lattes do autor: http://lattes.cnpq.br/9714532346150556

Dissertação de Mestrado defendida em 14 de fevereiro de 2025 e aprovada

pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof. Dr. PAULO JOSÉ DA SILVA E SILVA

Prof. Dr. ROBERTO ANDREANI

Prof. Dr. MAICON MARQUES ALVES

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001 e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) - Código do processo 2023/05564-1.

Resumo

Uma classe de problemas de interesse relativamente recente e de diversas aplicações práticas, porém de difícil análise e solução, é o de minimização de uma função continuamente diferenciável limitada inferiormente sobre um conjunto separável em blocos disjuntos, envolvendo uma penalidade e/ou limitação que implica na esparsidade desses blocos. Essa dissertação aborda esse tema sob a ótica da recente metodologia e teoria apresentada no artigo "Optimization problems involving group sparsity terms" de Amir Beck e Nadav Hallak (BECK; HALLAK, 2018a) com o intuito de comparar abordagens e apresentar intuições e ferramentas para o tratamento de problemas relevantes em campos como teoria dos grafos, *compressed sensing* e portfólios de investimentos. Serão abordados, nesse contexto, conceitos de mapeamento proximal, além de algoritmos eficientes para resolver os problemas estudados, enfatizando variações não monótonas. Particularmente, foram exploradas duas estratégias alternativas, sendo elas a aceleração de Nesterov com estratégia de inércia tipo FISTA (BECK; TEBOULLE, 2009a; BECK; TEBOULLE, 2009b) e métodos de segunda ordem quasi-Newton unidimensional (espectral ou Barzilai-Borwein-Raydan (BARZILAI; BORWEIN, 1988)) e algumas de suas variações, ademais incluindo pesquisas preliminares sobre o tema de modelos de segunda ordem com maior número de variáveis. Para ambas essas estratégias gerais, extensa pesquisa foi efetuada na literatura que traduz os resultados clássicos para o contexto dos nossos problemas, tendo em vista tanto a descontinuidade e não-convexidade da norma ℓ_0 e a natureza compósita do problema que difere dos problemas que originaram os métodos espectrais. Condições de continuidade de Lipschitz sobre o gradiente da parte suave para métodos com buscas lineares não monótonas foram abandonadas em favor de condições de continuidade uniforme, seguindo a tendência que (KANZOW; MEHLITZ, 2021) estabeleceu para versões monótonas. Foram produzidos novos resultados de convergência para hipóteses alternativas que permitem tanto descontinuidade quanto não monotonia dos algoritmos, elementos não conciliados anteriormente. Essas estratégias de demonstração também foram aplicadas em um novo algoritmo que utiliza ideias de aceleração FISTA com variável de monitoramento para lidar com funções não convexas, adaptado do trabalho (LI; LIN, 2015). Resultados numéricos preliminares apontam a eficácia de algumas dessas alternativas para o contexto investigado e estimulam um futuro aprofundamento no tema. Uma nova generalização do operador proximal para uma classe de funções envolvendo a norma ℓ_0 é também apresentada e demonstrada, com potencial emprego em modelagens que se beneficiariam de um maior controle da esparsidade das soluções.

Palavras-chave: Otimização compósita. Mapeamento proximal. Esparsidade de grupos. Relaxação de hipóteses de suavidade. Métodos proximais não monótonos. Estratégias de passo espectral. Métodos proximais acelerados. Experimentação numérica. Operador proximal com limitante inferior de esparsidade.

Abstract

A class of problems of relatively recent interest and of diverse practical applications, yet difficult to analyze and solve, is the minimization of an lower bounded continuously differentiable function over a disjoint block separable set, involving a penalty and/or constraint that result in the sparsity of such blocks. This dissertation covers this theme from the perspective of the recent methodology and theory presented in the article "Optimization problems involving group sparsity terms" by Amir Beck and Nadav Hallak (BECK; HALLAK, 2018a) in order to compare approaches and present insights and tools for the treatment of relevant problems in areas such as graph theory, compressed sensing and investment portfolios. In this context, concepts of proximal mappings will be treated, in addition to efficient algorithms to solve the studied problems, focusing on nonmonotone variants. Particularly, two alternative strategies were explored, namely Nesterov acceleration with a FISTA-type inertia strategy (BECK; TEBOULLE, 2009a; BECK; TEBOULLE, 2009b) and one-dimensional quasi-Newton second-order methods (spectral or Barzilai-Borwein-Raydan step methods (BARZILAI; BORWEIN, 1988)) and some of their variations, furthermore including preliminary research on the topic of second order models with higher number of variables. For both of these general strategies, extensive research was carried out in the literature that translates the classical results to the context of our problems, taking into account both the discontinuity and non-convexity of the ℓ_0 norm and the composite nature of the problem that differs from spectral methods' origins. Lipschitz continuity conditions on the gradient of the smooth part for methods with nonmonotone line searches were abandoned in favor of uniform continuity conditions, following the trend that (KANZOW; MEHLITZ, 2021) established for monotone versions. New convergence results have been produced for alternative hypotheses that allow for both discontinuity and non-monotonicity of the algorithms, elements that were not previously reconciled. These proof strategies were also applied to a new algorithm that incorporates FISTA acceleration ideas with a monitoring variable to handle non-convex functions, adapted from the work (LI; LIN, 2015). Preliminary numerical results indicate the effectiveness of some of these alternatives for the investigated context and encourage future delving into the topic. A new generalization of the proximal operator for a class of functions involving the ℓ_0 norm is also presented and demonstrated, with potential applications in modeling approaches that would benefit from greater control over the sparsity of the solutions.

Keywords: Composite optimazation. Proximal mapping. Group sparsity. Relaxing smoothness hypothesis. Nonmonotone proximal methods. Spectral step strategies. Accelerated proximal methods. Numerical experimentation. Lower bounded group sparsity proximal operator.

Lista de ilustrações

Figura 1 –	Casos com \mathbf{s}_i^k multivariado para $h = \lambda \ \cdot \ _0$. Em azul (preenchido) está $\omega_i^k(s)$, cujos valores ótimos em $[\tilde{\mathbf{l}}_i^k, \tilde{\mathbf{u}}_i^k]$ estão conectados em preto	
	(tracejado).	49
Figura 2 $-$	Espectrograma obtido com 20% das amostras não uniformemente espa-	
	$ \text{ gadas e } \mathbf{x}_0 = 0. \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	56
Figura 3 –	Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de m	68
Figura 4 –	Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de τ	00
Figura 4 –	com a norma ℓ_0	69
Figura 5 –	Diferentes perfis de desempenho do ANSPG para diferentes valores de	
	$n \operatorname{com} a \operatorname{norma} \ell_0$.	71
Figura 6 – Figura 7 –	Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a norma ℓ_0 . (a) Os gráficos de $\ \cdot\ _1$ (sólido), envalue, (pontilhado) e (b) o gráfico de	73
0	$(\ \cdot\ _1)_{\alpha}$, ambos em uma única variável. Próximo à origem, $(\ \cdot\ _1)_{\alpha}$ retém	
	a estrutura de $\ \cdot\ _1$, enfatizada em preto (sólido-pontilhado). Fonte:	
	(SHEN; SUTER; TRIPP, 2018)	75
Figura 8 –	Perfis de desempenho de tempo de CPU para diferentes regularizações.	76
Figura 9 –	Espectrograma obtido com 20% das amostras não uniformemente espa-	~
_	$cadas e \mathbf{x}_0 = 0.$	87
Figura 10 –	Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de δ	
	com a norma ℓ_0	88
Figura 11 –	Diferentes perfis de desempenho do NSPG para dois valores de τ com a	
	norma ℓ_0	88
Figura 12 –	Diferentes perfis de desempenho entre NSPG e NHSPG com a norma ℓ_0 .	89
Figura 13 –	Diferentes perfis de desempenho entre ANSPG e ANHSPG com a norma	
	ℓ_0 ,	89
Figura 14 –	Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos acelerados	
	com a norma ℓ_0	90
Figura 15 –	Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a norma ℓ_1 .	90
Figura 16 –	Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a regula-	
	rização MCP.	91

Lista de abreviaturas e siglas

UNICAMP Universidade Estadual de Campinas IMECC Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica LNLS Laboratório Nacional de Luz Síncrotron De Mordukhovich M-PG Proximal Gradient APG Accelerated Proximal Gradient FISTA Fast Iterative Soft Thresholding Algorithm GLL Grippo-Lampariello-Lucidi HZHager-Zhang IHT Iterative Hard Thresholding GSS Greedy Sparse-Simplex CWO Coordinate-Wise Optimality PCWO Partial Coordinate-Wise Optimality PGCD Partial Group Coordinate Descent LASSO Least Absolute Shrinkage and Selection Operator FFT Fast Fourier Transform Barzilai-Borwein-Raydan BBR SPG Spectral Projected Gradient CBBR Cyclic Barzilai-Borwein-Raydan DY Dai-Yuan TRDH Trust-Region method with Diagonal Hessian approximations iTRDH Indefinite Trust-Region method with Diagonal Hessian approximations

Lista de símbolos

∇f	Gradiente da função f
$\mathcal{C}_L^{1,1}$	Conjunto de funções \mathcal{C}^1 com gradiente Lipschitz contínuo com fator L
$\operatorname{dom} h$	Domínio efetivo da função h
$\widehat{\partial}h$	Subdiferencial regular de h
∂h	Subdiferencial limite ou Mordukhovich de \boldsymbol{h}
$\mathbb{X} \to \mathbb{Y}$	Morfismo entre $\mathbb X$ e $\mathbb Y$
$\{\cdot\}_K$	Subsequência K
\rightarrow	Converge em sequência implícita
\rightarrow_K	Converge em subsequência ${\cal K}$
\rightarrow_h	Converge tanto em sequência quanto em valor de \boldsymbol{h}
δ_C	Função indicadora de C

Lista de algoritmos

1	Nonmonotone Proximal Gradient method (NPG)	22
2	Accelerated Nonmonotone Proximal Gradient method (ANPG)	34
3	Subroutine for \mathbf{z}^{k+1}	35
4	Subroutine for \mathbf{v}^{k+1}	35
5	Group sparse proximal mapping	65

Sumário

Int	trodu	ição .		14		
1	Preliminares					
2	Esq	uemas	proximais com busca linear não monótona	20		
	2.1	Gradi	ente proximal não monótono	22		
		2.1.1	Resultados de convergência	23		
	2.2	Gradi	ente proximal não monótono acelerado	34		
		2.2.1	Resultados de convergência	36		
	2.3	Gradi	ente proximal com passo espectral	42		
		2.3.1	Relação com métodos quasi-Newton	44		
		2.3.2	Do gradiente espectral projetado ao gradiente espectral proximal	45		
		2.3.3	Alternativas de tamanho passo	46		
		2.3.4	Atualizações quasi-Newton de dimensão maior	48		
3	Otir	nização	o com esparsidade induzida pela norma zero	52		
	3.1	Defini	ções e exemplos	53		
	3.2	O ope	rador proximal grupo-esparso	59		
4	Exp	erimen	tos numéricos	67		
5 Considerações finais				77		
RE	FER	ÊNCIA	S	79		
Αι	pênc	lices		85		
AF	· APÊNDICE A Gráficos adicionais · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					

Introdução

Problemas de otimização irrestrita de uma função compósita F := f + h, constituída da soma de duas componentes, surgem em diversos campos de relevância prática. Entre eles estão seleção de carteiras de investimento, processamento de imagens e sinais e amostragem esparsa, entre outros. Veja (BECK; HALLAK, 2018a) e citações ali presentes para mais exemplos. Usualmente f é a parte suave e representa o objetivo principal a ser minimizado, enquanto h é chamada de regularização ou penalização e tem o objetivo de induzir características especiais na solução obtida pelo modelo. Dois exemplos comuns de características desejadas são a esparsidade de grupos de componentes ou componentes individuais (classicamente induzida pela norma ℓ_1 e suas variações ou com a norma ℓ_2 ao quadrado que gera componentes pequenos, porém não nulos), e a suavidade, isto é, menores saltos entre componentes subsequentes seguindo algum critério de ordenação (induzida pela função de variação total ou parcial).

Em particular, com o intuito de promover esparsidade, seria natural utilizar uma regularização que mede essa característica de forma direta, como a norma ℓ_0 , que conta o número componentes/grupos de componentes não nulos. Contudo, a regularização ℓ_1 se apresenta como uma alternativa contínua, convexa e cujo trato algorítmico e teoria de convergência, portanto, são de mais fácil obtenção, o que explica seu histórico de aplicação em contextos diversos. Logo, essa primeira norma pode ser entendida como uma tentativa de relaxar as características adversas da regularização ℓ_0 que desmotivaram seu emprego previamente. Com o desenvolvimento de uma teoria de estacionaridade e operador proximal para as funções h envolvendo a norma ℓ_0 em uma série de artigos recentes (BECK; HALLAK, 2016; BECK; ELDAR, 2012; BECK; HALLAK, 2018a; BECK; HALLAK, 2018b), abriram-se novas possibilidades para a modelagem compósita.

Esse é o tema dos Capítulos 1 e 2, que voltam sua atenção para a literatura em métodos eficientes para problemas compósitos relacionados a essas novas descobertas. Os métodos disponíveis e seus resultados de convergência não foram amplamente estudados até então para o caso no qual h é não-convexa e/ou descontínua e a parte suave f não possui gradiente (globalmente) Lipschitz contínuo.

Visando tratar regularizações descontínuas (e não convexas), fazem-se necessários novos métodos e teorias correspondentes. A fim de também analisar algumas estratégias não monótonas, como o tamanho de passo espectral e derivados, foram exploradas as ideias do artigo (KANZOW; MEHLITZ, 2021), discutido na Seção 2.1. Entretanto, a análise presente nesse artigo depende ou da monotonicidade na sequência de iterados do método ou da continuidade das funções envolvidas. O principal objetivo da Seção 2.1 é estender Outra direção a ser explorada é incorporar a aceleração de Nesterov empregada no método FISTA, ou como é mais genericamente conhecido, Accelerated Proximal Gradient method (APG), desenvolvido em (BECK; TEBOULLE, 2009a; BECK; TEBOULLE, 2009b). Esse método se provou amplamente influente tanto na literatura quanto em aplicações práticas desde sua introdução, tornando-se referência em otimização compósita convexa geral, para além das regularizações com a norma ℓ_1 originais. No cenário não convexo, contudo, essa estratégia sequer possui garantia de convergência, e muitas vezes apresenta desempenho inferior ao de métodos mais simples (LI; LIN, 2015).

O artigo (LI; LIN, 2015), que será examinado na Seção 2.2, propõe um método estilo FISTA com a introdução de uma sequência de monitoramento que utiliza um passo de gradiente proximal convencional a partir do último iterado. Dessa forma, o método se comporta bem mesmo na ausência de convexidade. Inspirado por essa ideia, será proposto um método levemente modificado de tal forma que a teoria desenvolvida inicialmente em (KANZOW; MEHLITZ, 2021) seja facilmente herdada.

Já no Capítulo 3, tanto o problema envolvendo esparsidade de grupos induzida pela norma ℓ_0 quanto o operador proximal genérico apresentado em (BECK; HALLAK, 2018a) serão abordados para uma classe ainda mais abrangente de funções *h*. Essa classe introduz um limitante inferior para os grupos não nulos, o que é potencialmente útil em casos em que uma diversidade mínima na solução é desejável, como em carteiras de investimento. Outro contexto de uso dessa variação é quando uma estimativa inferior da esparsidade da solução buscada em problemas inversos pode ser inferida através de projeções e dados teóricos e/ou do histórico das soluções provenientes de experimentos anteriores.

1 Preliminares

Considere o problema de otimização compósito

$$\min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) \coloneqq f(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{X},$$
(P)

onde $f : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável $(f \in \mathcal{C}^1), h : \mathbb{X} \to \overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ é semicontínua inferior (possivelmente com valores infinitos e descontínua) e \mathbb{X} denota um espaço euclidiano, ou seja, um espaço de Hilbert real e de dimensão finita. Será assumido o domínio efetivo de h, dom $h := \{\mathbf{x} \in \mathbb{X} \mid h(\mathbf{x}) < \infty\}$, não vazio para descartar situações triviais.

Ao longo dessa dissertação, o espaço X será equipado com o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle : X \times X \to \mathbb{R}$ e a norma induzida $\|\cdot\|$. Para um conjunto $A \subset X$ e ponto $\mathbf{x} \in X$, $A + \mathbf{x} = \mathbf{x} + A \coloneqq \{\mathbf{x} + \mathbf{a} \mid \mathbf{a} \in A\}$. Para uma sequência $\{\mathbf{x}^k\} \subset X$ e $\mathbf{x} \in X$, $\mathbf{x}^k \to_h \mathbf{x}$ significa que $\mathbf{x}^k \to \mathbf{x}$ e $h(\mathbf{x}^k) \to h(\mathbf{x})$. O conjunto $C_{L_f}^{1,1}$ contém todas as funções $f \in C^1$ (continuamente diferenciáveis) tais que ∇f é Lipschitz contínuo com fator L_f , isto é, $\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\| \leq L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \ \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$. Por fim, uma função g é dita uniformemente contínua se $\forall \epsilon > 0$, $\exists \delta > 0$ tal que, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$, $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| < \delta \implies |g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{y})| < \epsilon$, ou, equivalentemente, $\forall \{\mathbf{x}^k\}, \{\mathbf{y}^k\} \subset X$ tal que $\lim_{k \to \infty} \mathbf{x}^k - \mathbf{y}^k = 0$, então

$$\lim_{k \to \infty} g(\mathbf{x}^k) - g(\mathbf{y}^k) = 0.$$
(1.1)

Os conceitos a seguir são padrão em análise variacional (consulte (BECK, 2017, Capítulo 3) para mais detalhes). Seja $\mathbf{x} \in \text{dom } h$ um ponto fixo. Então

$$\widehat{\partial}h(\mathbf{x}) \coloneqq \left\{ \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{X} : \liminf_{\mathbf{y} \to \mathbf{x}} \frac{h(\mathbf{y}) - h(\mathbf{x}) - \langle \boldsymbol{\eta}, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle}{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|} \ge 0 \right\}$$

é denominado o subdiferencial regular (ou Fréchet) de h em **x**. Além disso, o conjunto $\partial h(\mathbf{x})$, definido pela relação

$$\boldsymbol{\eta} \in \partial h(\mathbf{x}) \iff \exists \{\mathbf{x}^k\}, \{\boldsymbol{\eta}^k\} \subset \mathbb{X} : \mathbf{x}^k \to_h \mathbf{x}, \ \boldsymbol{\eta}^k \to \boldsymbol{\eta}, \ \boldsymbol{\eta}^k \in \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^k) \ \forall k \in \mathbb{N},$$

é conhecido como o subdiferencial limite (ou de Mordukhovich) de h em **x**. Claramente, sempre vale que $\hat{\partial}h(\mathbf{x}) \subset \partial h(\mathbf{x})$ por construção. Quando h é convexa, a igualdade é válida, e ambos os subdiferenciais coincidem com o subdiferencial de análise convexa, isto é,

$$\partial h(\mathbf{x}) = \partial h(\mathbf{x}) = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{X} : h(\mathbf{y}) \ge h(\mathbf{x}) + \langle \boldsymbol{\eta}, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle \ \forall \mathbf{y} \in \mathbb{X} \}.$$

Aqui também vale a regra da soma (MORDUKHOVICH, 2018, Proposição

1.30)

$$\widehat{\partial}(f+h)(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}).$$
(1.2)

Assim, pelo princípio de Fermat (condição necessária de primeira ordem) (BECK, 2017, Teorema 3.63), se $\mathbf{x}^* \in \text{dom } h$ é um minimizador local de f + h, tem-se que $\mathbf{0} \in \nabla f(\mathbf{x}^*) + \hat{\partial}h(\mathbf{x}^*)$. No entanto, como o objetivo é trabalhar com funções h potencialmente não convexas, também será analisada a condição $\mathbf{0} \in \nabla f(\mathbf{x}^*) + \partial h(\mathbf{x}^*)$, potencialmente menos restritiva e mais comum na literatura nesse cenário. Um ponto $\mathbf{x}^* \in \text{dom } h$ satisfazendo $\mathbf{0} \in \nabla f(\mathbf{x}^*) + \hat{\partial}h(\mathbf{x}^*)$ será chamado de ponto estacionário de Fréchet (abreviado para F-estacionário) enquanto um que satisfaz $\mathbf{0} \in \nabla f(\mathbf{x}^*) + \partial h(\mathbf{x}^*)$ será chamado de ponto estacionário Mordukhovich (abreviado para M-estacionário) do problema (P). O termo ponto crítico limite também é usado na literatura em lugar de M-estacionaridade.

Com o intuito de minimizar a função $F : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$ em (P), é útil explorar sua estrutura compósita, ou seja, aproveitar a diferenciabilidade de f e algumas propriedades estruturais favoráveis de h. Essa é a ideia por trás dos chamados métodos forwardbackward ou de decomposição (*splitting*, em inglês), assim denominados pela característica de dividir a minimização principal em duas partes por iteração, uma para cada função. Esses métodos visam obter candidatos a minimizadores perseguindo pontos que satisfaçam alguma condição de estacionaridade apropriada. Para isso, eles utilizam o chamado operador proximal (MOREAU, 1962) que, em sua formulação mais clássica, é definido como

$$\operatorname{prox}_{h}(\mathbf{x}) \coloneqq \operatorname{arg\,min}_{\mathbf{u}\in\mathbb{X}} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^{2} \right\}$$

$$= \operatorname{arg\,min}_{\mathbf{u}\in\operatorname{dom} h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^{2} \right\}.$$
 (1.3)

Mais especificamente, os métodos em foco possuem a formulação iterativa genérica

$$\mathbf{x}^{k+1} \in \operatorname{prox}_{\gamma_k h}(\mathbf{y}^k - \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k)) \\ = \underset{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h}{\operatorname{arg\,min}} \left\{ \gamma_k h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{u} - \mathbf{y}^k + \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k)\|^2 \right\}$$

$$= \underset{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h}{\operatorname{arg\,min}} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{u} - \mathbf{y}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\mathbf{u} - \mathbf{y}^k\|^2 \right\}.$$

$$(1.4)$$

Na literatura, além da convencional escolha $\mathbf{y}^k = \mathbf{w}^k = \mathbf{x}^k$ (HUANG; LIU, 2014; BECK; HALLAK, 2018a; BECK, 2017; LECONTE; ORBAN, 2024; THEMELIS; STELLA; PA-TRINOS, 2018), foram testadas variações com alguma estratégia de inércia a partir do iterado anterior, seja ela constante como em (WU et al., 2021; BOŢ; CSETNEK; LÁSZLÓ, 2016) ou seguindo um esquema dinâmico como no método FISTA (BECK; ELDAR, 2012). Em (BOŢ; CSETNEK; LÁSZLÓ, 2016) é introduzido um esquema com dois termos de inércia constantes para as duas sequências auxiliares $\{\mathbf{y}^k\} \neq \{\mathbf{w}^k\}$ a fim de obter maior controle sobre o ponto estacionário obtido.

Já γ_k é o tamanho de passo, que pode ser dinâmico com estratégias de busca linear diversas (explorado em mais detalhes na Seção 2.1), ou constante, como por exemplo $\gamma_k = \frac{1}{L} \operatorname{com} L \ge L_f$ tal que $f \in \mathcal{C}_{L_f}^{1,1}$, presente no gradiente proximal e FISTA convencionais (BECK, 2017). **Observação 1.** Para que o subproblema (1.4) possua solução, é necessário que ele seja limitado por baixo. Uma função h é dita prox-limitada se $h + \frac{1}{2\gamma} \| \cdot \|^2$ é limitada por baixo para algum γ , e o supremo de todos esses γ é o fator de prox-limitação de h.

No geral, os métodos proximais tratam de funções h pelo menos limitadas por baixo por uma função afim (e muitas vezes simplesmente limitada por baixo), o que torna $h + \frac{1}{2\gamma} \| \cdot \|^2$ e, consequentemente, a função objetivo de (1.4) coercivas $\forall \gamma > 0$. No geral, é por esse motivo que a teoria para os algoritmos que serão apresentados mais adiante nesta seção é desenvolvida para $\gamma > 0$.

Em teoria, funções h fortemente convexas com fator σ , isso é, tais que $h - \frac{\sigma}{2} \| \cdot \|^2$ é convexa, aceitariam valores $\gamma \ge -\frac{1}{\sigma}$. Porém, pelo menos na literatura estudada, esse tipo de análise para o emprego de tamanhos de passo não positivos não é implementada. Ao invés disso, esses valores podem ser incorporados com o emprego de estratégias de região de confiança no esquema iterativo, como em (LECONTE; ORBAN, 2024), por exemplo. Como será explorado na Seção 2.3, dependendo da escolha de γ^k , a não positividade pode expressar informações sobre a negatividade da curvatura local da função objetivo e ser útil na convergência do método. Por esse motivo, há interesse atualmente em explorar essa possibilidade.

Observação 2. Do esquema (1.4), pela regra da soma (1.2) e o princípio de Fermat

$$\mathbf{0} \in \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^{k+1}) + \nabla f(\mathbf{w}^k) + \frac{1}{\gamma_k}(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$$
$$\iff \psi_k \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{w}^k) + \frac{1}{\gamma_k}(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^{k+1}) \in \widehat{\partial}F(\mathbf{x}^{k+1})$$

Portanto, novamente pelo princípio de Fermat agora para F, $\|\psi_k\| \leq \epsilon$ para algum $\epsilon > 0$ pode ser usado como critério de parada para métodos que seguem o esquema (1.4).

Alguns métodos vão além da definição do operador proximal clássico e utilizam o chamado operador proximal de Bregman (OSHER et al., 2005) para derivar o seguinte esquema

$$\mathbf{x}^{k+1} \in \operatorname{prox}_{\gamma_k h}^g(\mathbf{x}^k, \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k) - (\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k))$$

$$\coloneqq \operatorname{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ \gamma_k h(\mathbf{u}) + \langle \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k) - (\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k), \mathbf{u} \rangle + D_g(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) \right\}$$

$$= \operatorname{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{u} \rangle + \frac{1}{\gamma_k} \left[D_g(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - \langle \mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k, \mathbf{u} \rangle \right] \right\},$$
(1.5)

em que $D_g(\mathbf{u}, \mathbf{x}) := g(\mathbf{u}) - [g(\mathbf{x}) + \langle \nabla g(\mathbf{x}), \mathbf{u} - \mathbf{x} \rangle]$ é chamada distância de Bregman (BREGMAN, 1967), construída a partir de uma função g fortemente convexa (e diferenciável em seu domínio).

Note que de (1.4)

$$\begin{aligned} \operatorname{prox}_{\gamma_k h}(\mathbf{y}^k - \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k)) &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{u} - \mathbf{y}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\mathbf{u} - \mathbf{y}^k\|^2 \right\} \\ &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{u} \rangle \\ &+ \frac{1}{\gamma_k} \left[\frac{1}{2} \|\mathbf{u}\|^2 - \langle \mathbf{x}^k, \mathbf{u} - \mathbf{x}^k \rangle - \langle \mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k, \mathbf{u} \rangle \right] \right\} \\ &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{u} \rangle + \frac{1}{\gamma_k} \left[D_{\frac{1}{2} \|\cdot\|^2}(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - \langle \mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k, \mathbf{u} \rangle \right] \right\} \\ &= \operatorname{prox}_{\gamma_k h}^{\frac{1}{2} \|\cdot\|^2} (\mathbf{x}^k, \gamma_k \nabla f(\mathbf{w}^k) - (\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k)), \end{aligned}$$

assim relacionando os dois esquemas com a escolha $g = \frac{1}{2} \| \cdot \|^2$.

Muitas vezes esse esquema se prova uma alternativa interessante à (1.4) dependendo de h e da distância de Bregman, isso é, da função g, empregada. Uma boa escolha pode acelerar numericamente o cálculo de um elemento do prox ou até fornecer uma fórmula para computar esse elemento quando não se sabe trabalhar com o prox clássico de uma h. Como o operador proximal de Bregman não é o enfoque dessa dissertação, no entanto, será omitido maior aprofundamento no tópico.

Além disso, novos métodos estão incorporando distâncias induzidas por matrizes com estruturas específicas que simulam a Hessiana de f localmente. Desse modo, calcular o operador proximal em (1.5) é equivalente a minimizar uma aproximação de segunda ordem de F (LECONTE; ORBAN, 2024), uma ideia que se baseia em métodos quasi-Newton em otimização clássica. Na realidade, como será explorado em detalhes na Seção 2.3, o método do gradiente proximal com passo espectral pode ser compreendido como a incorporação de uma aproximação unidimensional da Hessiana no modelo iterativo, o que torna esse método, em teoria, razoável e respalda o interesse em testá-lo.

2 Esquemas proximais com busca linear não monótona

Existem vários métodos com convergência garantida para resolver (P). Esses resultados dependem geralmente de um de três fatores. O primeiro é $f \in C_{L_f}^{1,1}$ (continuamente diferenciável com gradiente Lipschitz contínuo) (LI; LIN, 2015; BOŢ; CSETNEK; LÁSZLÓ, 2016; WU et al., 2021; LIU; WANG; LIU, 2024). Dentre os métodos desses artigos, alguns possuem tamanho de passo limitado por, ou que tentam aproximar, $\frac{1}{L_f}$ (BOŢ; CSETNEK; LÁSZLÓ, 2016; LIU; WANG; LIU, 2024). Isso é particularmente indesejável, uma vez que, na prática, é muitas vezes verificado que $\frac{1}{L_f}$ é um tamanho de passo muito conservador que acarreta convergência lenta.

O segundo fator é f ser localmente convexa e diferenciável em um conjunto aberto de \mathbb{R}^n e na escolha adequada de um operador proximal genérico de Bregman (1.5) (BOLTE et al., 2018). Ademais, é necessária a existência de uma constante que relaciona esse operador à f. Essa constante também limita o tamanho de passo. Vale ressaltar que a liberdade para o uso do operador proximal de Bregman em si é um ponto positivo, e também aparece em (BOŢ; CSETNEK; LÁSZLÓ, 2016; LIU; WANG; LIU, 2024). Entretanto, a dependência da teoria de convergência nessa escolha favorável do usuário é uma limitação desse primeiro método. Além disso, a relação entre f e o operador pode não ser trivialmente demonstrável e sua respectiva constante pode ser de difícil obtenção.

O terceiro fator, por fim, é a imposição de monotonicidade dos valores de função dos iterados em (KANZOW; MEHLITZ, 2021), motivada pela perspectiva de abandonar a condição de suavidade de f que não se aplicava a certos problemas estudados pelos autores. Para algumas implementações, contudo, uma versão monótona não é interessante, uma vez que forçar decréscimo em cada iteração aumenta a chance de descarte do tamanho de passo inicial escolhido.

Esse fenômeno ocorre porque, sem exigir condição de decréscimo, algumas opções de tamanho de passo geram comportamentos naturalmente não monótonos. Na prática, isso não implica em métodos ineficientes, sendo frequentemente observadas convergências mais rápidas que a de alternativas monótonas, além de qualidade de soluções superior em problemas com múltiplos mínimos locais. Esse é o caso do método do gradiente proximal com passo espectral ou Barzilai-Borwein-Raydan (BBR) (BARZILAI; BORWEIN, 1988; RAYDAN, 1993; RAYDAN, 1997), que será tratado na Seção 2.3. A superioridade em termos de desempenho de alguns métodos não monótonos se deve ao fato de que a escolha inicial de passo possui alguma informação sobre a estrutura do problema. Assim, buscas demasiadamente exigentes como as monótonas limitam os benefícios dessa escolha inicial ao descartá-la com maior frequência.

2.1 Gradiente proximal não monótono

O trabalho (KANZOW; MEHLITZ, 2021) apresentou um método com busca linear com condição de decréscimo da função objetivo usando a estratégia Grippo-Lampariello-Lucidi (GLL) (GRIPPO; LAMPARIELLO; LUCIDI, 1986), permitindo uma versão não monótona. O artigo prova resultados de convergência mais fracos que os anteriores. Isso se deve à ausência da hipótese usual de continuidade de Lipschitz global de ∇f . Ademais, resultados de convergência com busca não monótona só foram possíveis com hipóteses de continuidade de h e continuidade uniforme restrita de F.

Algorithm 1 Nonmonotone Proximal Gradient method (NPG) Input: $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{X}$, $\gamma_{\max} > \gamma_{\min} > 0$, $m \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1)$ and $\tau \in (0, 1)$ Output: Last \mathbf{x}^{k+1} computed or \mathbf{x}^{best}

- 1: Initialize $k \coloneqq 0$
- 2: repeat
- 3: Choose $\gamma_{k,0} \in [\gamma_{\min}, \gamma_{\max}]$
- 4: Initialize $i \coloneqq 0$
- 5: **while**

$$F(\mathbf{x}^{k,i}) > \max_{0 \le j \le \min\{k,m-1\}} F(\mathbf{x}^{k-j}) - \frac{\delta}{2\gamma_{k,i}} \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k\|^2$$
(2.1)

where

$$\mathbf{x}^{k,i} \in \operatorname{prox}_{\gamma_{k,i}h} \left(\mathbf{x}^{k} - \gamma_{k,i} \nabla f(\mathbf{x}^{k}) \right)$$

=
$$\operatorname{arg\,min}_{\mathbf{u} \in \operatorname{dom} h} \left\{ \left\langle \nabla f(\mathbf{x}^{k}), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{k} \right\rangle + \frac{1}{2\gamma_{k,i}} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}^{k}\|^{2} + h(\mathbf{u}) \right\}$$
(2.2)

```
do

6: \gamma_{k,i+1} \leftarrow \tau \gamma_{k,i}

7: i \leftarrow i+1

8: end while

9: \gamma_k \leftarrow \gamma_{k,i} and \mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{x}^{k,i}

10: k \leftarrow k+1

11: until A suitable termination criterion is violated at iteration k
```

Portanto, para variações do método com m > 1, que permitem não monotonicidade, faz-se necessário estender os resultados de convergência para o caso de regularizações descontínuas. De fato, é possível uma relaxação nas hipóteses de convergência sobre hpara o esquema em questão com apenas pequenas modificações que quase não diminuem a abrangência da teoria.

Devido à escolha livre de tamanho de passo inicial, somente restrita a uma caixa arbitrariamente definida, esse resultado permite o emprego de uma ampla gama de estratégias de tamanho inicial de passo. Algumas das opções incluem o passo espectral com retardos (FRIEDLANDER et al., 1999), o BBR alternado (DAI; FLETCHER, 2005b), BBR cíclico (DAI et al., 2005), entre outros mencionados na Seção 2.3. Ao acomodar certa não monotonicidade, os benefícios dessas estratégias se tornam mais expressivos.

Uma possível modificação simples e de amplo emprego em outros esquemas não monótonos é retornar

$$\mathbf{x}^{best} \in \underset{\mathbf{x}^k \in \{\mathbf{x}^k\}}{\arg\min} F(\mathbf{x}^k), \tag{2.3}$$

em que $\{\mathbf{x}^k\}$ é a sequência gerada pelo NPG, ao invés do último iterado calculado. Para isso é necessário modificar levemente o esquema, porém esses detalhes serão omitidos e não interferem nos resultados.

2.1.1 Resultados de convergência

Ao longo do restante deste capítulo, $\forall k \in \mathbb{N}$, denota-se $l(k) \in \{k - \min\{k, m - 1\}, \ldots, k\}$ um índice tal que $F(\mathbf{x}^{l(k)}) = \max_{0 \leq j \leq \min\{k, m-1\}} F(\mathbf{x}^{k-j})$. Serão necessárias as seguintes condições para as futuras demonstrações.

Hipótese 1.

- (a) A função f é limitada inferiormente em dom h;
- (b) A função h é limitada inferiormente.

Apesar de somente a Hipótese 1 (b) ser necessária para o Lema 1 abaixo, essa foi agrupada à condição (a) visto que juntas elas implicam que F como um todo é limitada inferiormente, uma condição razoável que evita problemas da forma (P) sem soluções ou com soluções cujo valor de função é ilimitado. Outro aspecto importante da Hipótese 1 (b) é que, para um $k, i \in \mathbb{N}$ fixo, ela implica em subproblemas da forma (2.2) coercivos $\forall \gamma_k > 0$ e, portanto, dotados de ao menos uma solução (potencialmente não única, dependendo de h). Em outras palavras, h é prox-limitada $\forall \gamma > 0$ (veja a Observação 1).

De fato, essas condições são mais fortes do que as apresentadas em (KANZOW; MEHLITZ, 2021), em que somente F precisava ser limitada inferiormente e h limitada inferiormente por uma função afim. No entanto, em diversos contextos h representa uma penalização coerciva (como uma norma) ou, ao menos, não negativa. Já a f é escolhida de modo que também seja limitada inferiormente, muitas vezes porque já era minimizada isoladamente em um contexto prévio sem penalização. Dessa forma, as mudanças empregadas não representam uma grande perda de aplicabilidade.

Primeiramente, a boa definição do método é estabelecida demonstrando-se que a regra de decréscimo para o tamanho de passo (2.1) é alcançada em finitas iterações.

Lema 1. Considere a Hipótese 1 (b) válida e uma iteração fixa k do Algoritmo 1. Suponha que \mathbf{x}^k não seja um ponto M-estacionário do problema (P). Então a condição (2.1) do

Algoritmo 1 é satisfeita em um número finito de iterações, ou seja, tem-se $\gamma_k = \gamma_{k,i_k}$ para algum índice finito $i_k \in \{0, 1, 2, ...\}$.

Demonstração. Suponha que o *loop* interno do Algoritmo 1 não termine após um número finito de passos na iteração k. Como $\mathbf{x}^{k,i}$ é uma solução de (2.2) com $\gamma_{k,i}$, tem-se

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_{k,i}} \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\mathbf{x}^{k,i}) \leq h(\mathbf{x}^k).$$
 (2.4)

Como $\gamma_{k,i} \to 0$ quando $i \to \infty$, usando a continuidade de ∇f e a Hipótese 1 (b), a relação acima implica $\mathbf{x}^{k,i} \to \mathbf{x}^k$ quando $i \to \infty$. Ao tomar o limite, obtém-se

$$h(\mathbf{x}^k) \leqslant \liminf_{i \to \infty} h(\mathbf{x}^{k,i}) \leqslant \limsup_{i \to \infty} h(\mathbf{x}^{k,i}) \leqslant h(\mathbf{x}^k)$$

onde a primeira desigual dade segue da semicontinuidade inferior de h e a desigual dade final é consequência de (2.4). Portanto, tem-se que

$$h(\mathbf{x}^{k,i}) \to h(\mathbf{x}^k), \text{ para } i \to \infty.$$
 (2.5)

Será demonstrado que

$$\liminf_{i \to \infty} \frac{1}{\gamma_{k,i}} \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \right\| > 0.$$
(2.6)

Suponha, por contradição, que existe uma subsequência $i_j \rightarrow_{j \rightarrow \infty} \infty$ tal que

$$\liminf_{j \to \infty} \frac{1}{\gamma_{k,i_j}} \left\| \mathbf{x}^{k,i_j} - \mathbf{x}^k \right\| = 0.$$
(2.7)

Como \mathbf{x}^{k,i_j} é ótimo para (2.2), o princípio de Fermat e a regra da soma (1.2) fornecem

$$0 \in \nabla f(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{\gamma_{k,i_j}}(\mathbf{x}^{k,i_j} - \mathbf{x}^k) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^{k,i_j}) \quad \forall j.$$
(2.8)

Tomando o limite $j \rightarrow \infty$ e usando (2.5), (2.7) e a definição do subdiferencial, obtém-se

$$0 \in \nabla f(\mathbf{x}^k) + \partial h(\mathbf{x}^k),$$

o que significa que \mathbf{x}^k é um ponto M-estacionário de (P) pela definição. Isso contradiz a suposição do enunciado e mostra que (2.6) deve ser satisfeito. Portanto, existe uma constante c > 0 tal que

$$\frac{1}{\gamma_{k,i}} \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \right\| \ge c \quad \forall i$$

Em particular, isso implica

$$(1-\delta)\frac{1}{2\gamma_{k,i}} \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \right\|^2 \ge \frac{1-\delta}{2} c \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \right\| \ge o \left(\left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k \right\| \right)$$
(2.9)

 $\forall i \text{ suficientemente grande.}$

Utilizando uma expansão de Taylor da função $f \text{ em } \mathbf{x}^k$, (2.9), (2.4) e a definição de l(k), finalmente tem-se que

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}^{k,i}) - F(\mathbf{x}^{l(k)}) &\leq F(\mathbf{x}^{k,i}) - F(\mathbf{x}^{k}) \\ &= f(\mathbf{x}^{k,i}) + h(\mathbf{x}^{k,i}) - f(\mathbf{x}^{k}) - h(\mathbf{x}^{k}) \\ &= \langle \nabla f(\mathbf{x}^{k}), \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^{k} \rangle + h(\mathbf{x}^{k,i}) - h(\mathbf{x}^{k}) + o\left(\left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^{k} \right\| \right) \\ &\leq -\frac{1}{2\gamma_{k,i}} \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^{k} \right\|^{2} + o\left(\left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^{k} \right\| \right) \\ &\leq -\frac{\delta}{2\gamma_{k,i}} \left\| \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^{k} \right\|^{2} \end{aligned}$$

 $\forall i$ suficientemente grande. Isso, no entanto, implica que $\exists i \in \mathbb{N}$ para o qual o critério de aceitação (2.1) é válido, completando a demonstração.

Os resultados subsequentes assumem implicitamente que o NPG gera uma sequência infinita de iterados. Primeiramente, o lema a seguir estabelece o comportamento de $\{F(\mathbf{x}^{l(k)})\}$.

Lema 2. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 1. Então $\{F(\mathbf{x}^{l(k)})\}$ decresce monotonicamente.

Demonstração. Essa prova segue (KANZOW; MEHLITZ, 2021, Lema 4.1). Como min{k + 1, m - 1} ≤ min{k, m - 1} + 1, tem-se

$$F(\mathbf{x}^{l(k+1)}) = \max_{0 \le j \le \min\{k+1,m-1\}} F(\mathbf{x}^{k+1-j})$$

$$\leq \max_{0 \le j \le \min\{k+1,m-1\}+1} F(\mathbf{x}^{k+1-j})$$

$$= \max\left\{\max_{0 \le j \le \min\{k,m-1\}} F(\mathbf{x}^{k-j}), F(\mathbf{x}^{k+1})\right\}$$

$$= \max\left\{F(\mathbf{x}^{l(k)}), F(\mathbf{x}^{k+1})\right\}$$

$$= F(\mathbf{x}^{l(k)}),$$

em que a última igualdade é consequência da desigualdade (2.1) reescrita na forma

$$F(\mathbf{x}^{k+1}) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(k)}) - \delta \frac{\gamma_k}{2} \left\| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \right\|^2.$$

Além disso, segue imediatamente que a sequência de iterados pertence ao subnível $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$, sendo $\mathcal{L}_c(F) := \{\mathbf{x} \in \mathbb{X} : F(\mathbf{x}) \leq c\}, \ \forall c \in \mathbb{R}.$

Corolário 1. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 1. Então $\{\mathbf{x}^k\} \subset \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$.

Demonstração. Obviamente $\mathbf{x}^0 \in \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$ por definição. Já para k > 0, como por construção l(0) = 0, pelo Lema 2 segue que

$$F(\mathbf{x}^k) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(k-1)}) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(0)}) = F(\mathbf{x}^0), \qquad (2.10)$$

isso é, $\{\mathbf{x}^k\} \subset \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$.

Em vista do Corolário 1, um detalhe importante para a aplicação da Hipótese 1 (a) é que $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F) \subset \operatorname{dom} h$ devido a f ser finita. A seguir, apresenta-se um resultado relevante para o Teorema 1.

Lema 3. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 1 e $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para um ponto \mathbf{x}^* com $\gamma_k \to_{K'} 0$ para alguma subsequência $K' \subset K$. Então vale que $\frac{1}{\gamma_k} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \to_{K'} 0$.

Demonstração. Sem perda de generalidade, é possível supor que o critério de aceitação (2.1) é violado na primeira iteração do *loop* interno $\forall k \in K'$, uma vez que $\gamma_{k,0} \ge \gamma_{\min} > 0$. Dessa forma, para $\hat{\gamma}_k := \gamma_k / \tau, k \in K'$, também tem-se $\hat{\gamma}_k \to_{K'} 0$, e o vetor correspondente $\hat{\mathbf{x}}^k := \mathbf{x}^{k,i_k-1}$ (sendo i_k tal que $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k,i_k}$) não satisfaz a condição de tamanho do passo (2.1), isto é,

$$F(\hat{\mathbf{x}}^k) > F(\mathbf{x}^{l(k)}) - \frac{\delta}{2\hat{\gamma}_k} \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|^2 \quad \forall k \in K'.$$
(2.11)

Por outro lado, como $\hat{\mathbf{x}}^k$ resolve o subproblema correspondente (2.2) com $\hat{\gamma}_k$, tem-se que

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\hat{\gamma}_k} \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\hat{\mathbf{x}}^k) - h(\mathbf{x}^k) \leqslant 0.$$
(2.12)

De (2.12), da desigualdade de Cauchy-Schwarz e do Corolário 1, é obtido

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\hat{\gamma}_k} \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|^2 &\leq \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \hat{\mathbf{x}}^k \rangle + h(\mathbf{x}^k) - h(\hat{\mathbf{x}}^k) \\ &\leq \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\| \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| + h(\mathbf{x}^k) - h(\hat{\mathbf{x}}^k) \\ &= \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\| \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| + F(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^k) - h(\hat{\mathbf{x}}^k) \\ &\leq \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\| \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| + F(\mathbf{x}^0) - f(\mathbf{x}^k) - h(\hat{\mathbf{x}}^k). \end{aligned}$$

Como f é continuamente diferenciável, e -f e -h limitadas superiormente em vista da Hipótese 1, isso implica $\|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| \to_{K'} 0$. De fato, se $\{\|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|\}_{K'}$ fosse ilimitada em uma subsequência de K', então o lado esquerdo cresceria mais rapidamente do que o lado direito. Já se $\{\|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|\}_{K'}$ fosse limitado, mas distante de zero por um número positivo pelo menos em uma subsequência de K', o lado direito seria limitado, enquanto o lado esquerdo seria ilimitado em tal subsequência. Assim $\hat{\mathbf{x}}^k \to_{K'} \mathbf{x}^k$.

Agora, pelo teorema do valor médio, existe ξ^k no segmento de reta que conecta \mathbf{x}^k com $\hat{\mathbf{x}}^k$ tal que

$$F(\hat{\mathbf{x}}^{k}) - F(\mathbf{x}^{k}) = f(\hat{\mathbf{x}}^{k}) + h(\hat{\mathbf{x}}^{k}) - f(\mathbf{x}^{k}) - h(\mathbf{x}^{k})$$

= $\langle \nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}), \hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k} \rangle + h(\hat{\mathbf{x}}^{k}) - h(\mathbf{x}^{k}).$ (2.13)

Substituindo a expressão $h(\hat{\mathbf{x}}^k) - h(\mathbf{x}^k)$ de (2.13) em (2.12) resulta em

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\boldsymbol{\xi}^k), \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\hat{\gamma}_k} \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|^2 + F(\hat{\mathbf{x}}^k) - F(\mathbf{x}^k) \leqslant 0$$

Utilizando (2.11) e da definição de l(k) obtém-se, portanto,

$$\begin{split} \frac{1}{2\hat{\gamma}_{k}} \|\hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k}\|^{2} &\leq \langle \nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k}), \hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k} \rangle + F(\mathbf{x}^{k}) - F(\hat{\mathbf{x}}^{k}) \\ &\leq \langle \nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k}), \hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k} \rangle + F(\mathbf{x}^{l(k)}) - F(\hat{\mathbf{x}}^{k}) \\ &< \|\nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k})\| \|\hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k}\| + \delta \frac{1}{2\hat{\gamma}_{k}} \|\hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k}\|^{2}, \end{split}$$

que pode ser reescrito como

$$(1-\delta)\frac{1}{2\hat{\gamma}_k}\|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| \leq \|\nabla f(\boldsymbol{\xi}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^k)\|.$$
(2.14)

Como $\mathbf{x}^k \to_{K'} \mathbf{x}^*$ (por suposição) e $\hat{\mathbf{x}}^k \to_{K'} \mathbf{x}^*$ (pela parte anterior dessa demonstração), segue também que $\boldsymbol{\xi}^k \to_{K'} \mathbf{x}^*$. Usando que $\hat{\mathbf{x}}^k \neq \mathbf{x}^k$ em vista de (2.11), $\delta \in (0, 1)$ e a diferenciabilidade contínua de f, segue de (2.14) que

$$\frac{1}{\hat{\gamma}_k} \| \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \| \to_{K'} 0.$$
(2.15)

Utilizando que \mathbf{x}^{k+1} e $\hat{\mathbf{x}}^k$ são soluções dos subproblemas (2.2) com parâmetros γ_k e $\hat{\gamma}_k$, respectivamente, obtém-se

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\mathbf{x}^{k+1})$$

$$\leqslant \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\hat{\mathbf{x}}^k),$$

е

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\hat{\gamma}_k} \| \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \|^2 + h(\hat{\mathbf{x}}^k)$$

$$\leqslant \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\hat{\gamma}_k} \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \|^2 + h(\mathbf{x}^{k+1})$$

Somando essas duas desigualdades e constatando que $0 < \gamma_{\min} \leq \gamma_k = \tau \hat{\gamma}_k < \hat{\gamma}_k$, verifica-se que $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \leq \|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\|$, e com isso, finalmente,

$$0 \leqslant \frac{1}{\gamma_k} \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \| = \frac{\tau}{\hat{\gamma}_k} \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \| \leqslant \frac{\tau}{\hat{\gamma}_k} \| \hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k \| \to_{K'} 0,$$

onde o último limite segue de (2.15). Logo $\frac{1}{\gamma_k} \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \| \to_{K'} 0.$

Da demonstração do lema anterior, é direto derivar o seguinte resultado adicional.

Lema 4. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 1, $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para um ponto \mathbf{x}^* e suponha que ∇f é localmente Lipschitz contínua em torno de \mathbf{x}^* . Então $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_K$ é limitada.

Demonstração. Suponha $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_K$ ilimitada. Pelo Lema 1, $\exists K' \subset K$ tal que $\gamma_k \to_{K'} 0$. É possível argumentar como na prova do Lema 3 e definir $\hat{\mathbf{x}}^k$ e $\hat{\gamma}_k$ também como nessa prova, novamente relembrando que também da hipótese inicial tem-se que $\hat{\gamma}_k \to_{K'} 0$.

Seja L > 0 a constante local de Lipschitz de ∇f em torno de \mathbf{x}^* . Relembre que da demonstração anterior $\|\hat{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\| \to_{K'} 0$, logo $\mathbf{x}^k, \hat{\mathbf{x}}^k \to_{K'} \mathbf{x}^*$. Uma vez que $\boldsymbol{\xi}_k$ está no segmento de linha entre \mathbf{x}^k e $\hat{\mathbf{x}}^k$, utilizando (2.14) obtém-se, portanto,

$$(1-\delta)\frac{1}{2\hat{\gamma}_{k}}\|\hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k}\| \leq \|\nabla f(\xi^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k})\|$$
$$\leq L\|\xi^{k} - \mathbf{x}^{k}\|$$
$$\leq L\|\hat{\mathbf{x}}^{k} - \mathbf{x}^{k}\|$$

para todo $k \in K'$ suficientemente grande. Como $\hat{\gamma}_k \to_{K'} 0$ e $\hat{\mathbf{x}}^k \neq \mathbf{x}^k$ tendo em vista (2.11), é gerada uma contradição. Logo, $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_K$ deve ser limitada.

Para prosseguir, serão introduzidas as seguintes condições adicionais.

Hipótese 2. $\exists k^* \in \mathbb{N}$ tal que $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^{l(k^*)})}(F)$ é limitado ou que ∇f e f são uniformemente contínuas em $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^{l(k^*)})}(F)$.

Note que a primeira opção nessa hipótese implica a segunda, uma vez que o conjunto de subnível seria então compacto pela semicontinuidade inferior de F. Logo, visto que $f \in C^1$ por hipótese, tanto ∇f quanto f seriam uniformemente contínuas nesse compacto. De qualquer forma, a limitação do conjunto de subnível será mantida como um meio alternativo de verificação dessa hipótese. Além disso, a Hipótese 2 é imediata caso Fseja coerciva, uma vez que $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^{l(0)})}(F) = \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$ seria limitado. Mesmo que esse não seja o caso, f satisfazer essas condições por si só é plausível para diversos tipos de cenários que emergem na prática.

O primeiro resultado de grande nota pode finalmente ser enunciado. É justamente a contraparte dessa proposição em (KANZOW; MEHLITZ, 2021) que requer a condição de continuidade uniforme de F em $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$ que (em geral) não pode ser garantida nos problemas de interesse. Apesar da seguinte demonstração se pautar nas técnicas desse último artigo, para limitar a restrição da continuidade uniforme somente à f, faz-se necessária a introdução da continuidade uniforme de ∇f na Hipótese 2. Dessa forma, o resultado vale para h somente semicontínua inferior, como desejado.

Proposição 1. Considere a Hipótese 1 e a Hipótese 2 válidas. Então a sequência $\{x^k\}$ gerada pelo Algoritmo 1 satisfaz $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \to 0$.

Demonstração. Suponha que esse resultado não seja verdadeiro. Então existem uma subsequência Ke constante c>0tais que

$$\|\mathbf{d}^k\| \ge c \quad \forall k \in K,\tag{2.16}$$

sendo $\mathbf{d}^k := \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \ \forall k \in \mathbb{N}.$

Seja $K^+ = \{k + m \mid k \in K\}$. Como F é limitada inferiormente devido à Hipótese 1 como um todo, Lema 2 implica que

$$\lim_{k \to \infty} F(\mathbf{x}^{l(k)}) = F^* \tag{2.17}$$

para algum $F^* \in \mathbb{R}$ finito. Do Corolário 1, verifica-se que $\{\mathbf{x}^{l(k)}\} \subset \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$. Lembrando a definição de l(k), a regra não monótona do tamanho do passo (2.1) com k substituído por l(k) - p - 1 para algum $p \in \mathbb{N}$ resulta em $F(\mathbf{x}^{l(k)-p}) \leq F(\mathbf{x}^{l(l(k)-p-1)})$ (aqui considera-se implicitamente que k é grande o suficiente para que nenhum índice negativo l(k) - p - 1ocorra). Mais especificamente, para p = 0, tem-se

$$F(\mathbf{x}^{l(k)}) - F(\mathbf{x}^{l(l(k)-1)}) \leq -\frac{\delta}{2\gamma_{l(k)-1}} \|\mathbf{d}^{l(k)-1}\|^2 \leq 0$$

Tomando o limite $k \rightarrow_{K^+} \infty$ na desigualdade anterior e usando (2.17), obtém-se, portanto,

$$\lim_{k \to \infty} \frac{1}{\gamma_{l(k)-1}} \left\| \mathbf{d}^{l(k)-1} \right\|^2 = 0$$
(2.18)

e como $0 \leq \gamma_k \leq \gamma_{\max} \ \forall k \in \mathbb{N}$, tem-se que

$$\lim_{k \to \infty} \mathbf{d}^{l(k)-1} = 0.$$
 (2.19)

Primeiro será tratado o caso o qual ∇f é uniformemente contínua em $\mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$. Hipótese 1 (a) e (b) e (2.17) juntos implicam $\{f(\mathbf{x}^{l(k)})\}_{K^+}$ e $\{h(\mathbf{x}^{l(k)})\}_{K^+}$ limitados, portanto existe uma subsequência $K^* \subset K^+$ tal que $\lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)}) \coloneqq f^*$ e $\lim_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)}) \coloneqq h^*$ e ainda por cima

$$f^* + h^* = F^*. (2.20)$$

Usando (2.19), segue que

$$f^* = \lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)}) = \lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)-1} + \mathbf{d}^{l(k)-1}) = \lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)-1})$$
(2.21)

onde a última igualdade leva em conta a continuidade uniforme de $f \forall k$ suficientemente grande e (1.1), uma vez que $F(\mathbf{x}^k) \leq F(\mathbf{x}^{l(k-1)}) \leq \ldots \leq F(\mathbf{x}^{l(k^*)})$ de (2.1) e Lema 2. Dessa forma $\mathbf{x}^k \in \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^{l(k^*)})}(F) \forall k > k^*$, sendo k^* o índice para o qual vale a Hipótese 2.

Como $\mathbf{x}^{l(k)}$ satisfaz (2.2) com $\gamma_{l(k)-1}$, tem-se que

$$h(\mathbf{x}^{l(k)}) \leq h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - \langle \nabla f(\mathbf{x}^{l(k)-1}), \mathbf{d}^{l(k)-1} \rangle - \frac{1}{2\gamma_{l(k)-1}} \|\mathbf{d}^{l(k)-1}\|^2.$$
(2.22)

Já pelo teorema do valor médio, existe $\boldsymbol{\xi}^k$ no segmento de reta que conecta $\mathbf{x}^{l(k)-1}$ com $\mathbf{x}^{l(k)}$ tal que

$$h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) + F(\mathbf{x}^{l(k)}) - F(\mathbf{x}^{l(k)-1}) = f(\mathbf{x}^{l(k)}) + h(\mathbf{x}^{l(k)}) - f(\mathbf{x}^{l(k)-1})$$
$$= \langle \nabla f(\boldsymbol{\xi}^k), \mathbf{d}^{l(k)-1} \rangle + h(\mathbf{x}^{l(k)}).$$

Substituindo a expressão para $h(\mathbf{x}^{l(k)-1})$ acima em (2.22) produz, juntamente com a desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$h(\mathbf{x}^{l(k)}) \leq h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - \langle \nabla f(\mathbf{x}^{l(k)-1}), \mathbf{d}^{l(k)-1} \rangle - \frac{1}{2\gamma_{l(k)-1}} \| \mathbf{d}^{l(k)-1} \|^{2}$$

$$= F(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - f(\mathbf{x}^{l(k)})$$

$$+ \langle \nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{l(k)-1}), \mathbf{d}^{l(k)-1} \rangle - \frac{1}{2\gamma_{l(k)-1}} \| \mathbf{d}^{l(k)-1} \|^{2} \qquad (2.23)$$

$$\leq F(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - f(\mathbf{x}^{l(k)})$$

$$+ \| \nabla f(\boldsymbol{\xi}^{k}) - \nabla f(\mathbf{x}^{l(k)-1}) \| \| \mathbf{d}^{l(k)-1} \| - \frac{1}{2\gamma_{l(k)-1}} \| \mathbf{d}^{l(k)-1} \|^{2}.$$

pela continuidade uniforme de ∇f no conjunto de subnível para $k \ge k^*$ da Hipótese 2 e como (2.19) implica $\boldsymbol{\xi}^k - \mathbf{x}^{l(k)-1} \to_{K^*} 0$, então $\|\nabla f(\boldsymbol{\xi}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{l(k)-1})\| \to_{K^*} 0$. Ademais, tomando o limite inferior em K^* na relação acima juntamente com (2.18) e (2.21) resulta em

$$h^* \leq \liminf_{k \to K^* \infty} F(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - f(\mathbf{x}^{l(k)})$$

$$= \liminf_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)-1}) + h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) - f(\mathbf{x}^{l(k)})$$

$$= \liminf_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)-1})$$

$$\leq \limsup_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)-1}).$$

(2.24)

Por outro lado, de (2.1) tem-se

$$f(\mathbf{x}^{l(k)-1}) + h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) = F(\mathbf{x}^{l(k)-1}) \le F(\mathbf{x}^{l(l(k)-2)})$$

Tomando o limite superior em K^* na relação acima e usando (2.17), sem perda de generalidade, com l(k) - 2 em vez de k, além de (2.20) e (2.21), resulta em

$$\limsup_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) \leq \limsup_{k \to K^* \infty} F(\mathbf{x}^{l(l(k)-2)}) - f(\mathbf{x}^{l(k)-1}) = F^* - f^* = h^*$$

Portanto, tendo em vista (2.24),

$$\lim_{k \to K^*} h(\mathbf{x}^{l(k)-1}) = h^*.$$
(2.25)

Será provado agora, por indução, que os limites

$$\lim_{k \to K^* \infty} \mathbf{d}^{l(k)-j} = 0, \quad \lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)-j}) = f^*, \quad \lim_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)-j}) = h^*, \tag{2.26}$$

sendo $F^* = f^* + h^*$, são válidos $\forall j \in \mathbb{N} \text{ com } j \ge 1$. Já se sabe por (2.19), (2.21) e (2.25) que (2.26) vale para j = 1. Suponha que (2.26) vale para algum $j \ge 1$. É necessário mostrar que também vale para j + 1. Usando a regra do tamanho do passo não monótono (2.1) com k substituído por l(k) - j - 1 tem-se

$$F(\mathbf{x}^{l(k)-j}) \leq F(\mathbf{x}^{l(l(k)-j-1)}) - \frac{\delta}{2\gamma_{l(k)-j-1}} \|\mathbf{d}^{l(k)-j-1}\|^2$$

(novamente, é assumido implicitamente que k é grande o suficiente para que l(k) - j - 1seja não negativo). Reorganizando essa expressão e usando $\gamma_k \leq \gamma_{\max} \, \forall k$ resulta em

$$\left\|\mathbf{d}^{l(k)-j-1}\right\|^2 \leqslant \frac{2\gamma_{\max}}{\delta} \left(F(\mathbf{x}^{l(l(k)-j-1)}) - F(\mathbf{x}^{l(k)-j})\right)$$

Tomando $k \rightarrow_{K^*} \infty$, usando (2.17), bem como a hipótese de indução, segue que

$$\lim_{k \to K^* \infty} \mathbf{d}^{l(k)-j-1} = 0,$$

que se trata do passo de indução para o primeiro limite em (2.26). Os demais limites de (2.26) envolvendo valores de função para j + 1 seguem da hipótese de indução e um argumento semelhante àquele que provou (2.21) e (2.25) com l(k) - j no lugar de l(k).

Na última etapa da prova, será mostrado que $\lim_{k\to K'^{\infty}} \mathbf{d}^k = 0$ vale para $K' = \{k - m \mid k \in K^*\}$ e existe, portanto, uma subsequência de K tal que a suposição (2.16) é contradita. Lembre-se de que pela construção de K^+ (logo K^* também), $\forall k \in K^*, k' := k - m \in K' \subset K$. O índice correspondente l(k) é um dos índices $k - m + 1, k - m + 2, \ldots, k$. Dessa maneira, é possível escrever $k' = l(k) - j_{k'}$ para algum $j_{k'} \in \{1, 2, \ldots, m\}$. Como existem apenas um número finito de possíveis $j_{k'}$ s, sem perda de generalidade é assumido $j_{k'} = j$ para algum $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$ fixo. Então (2.26) implica

$$\lim_{k \to_{K'} \infty} \mathbf{d}^k = \lim_{k \to_{K^*} \infty} \mathbf{d}^{l(k)-j} = 0.$$

Isto contradiz (2.16) e completa a demonstração.

Observação 3. Seja \mathbf{x}^* um ponto de acumulação isolado de uma sequência gerada pelo Algoritmo 1. Então toda a sequência converge para \mathbf{x}^* em vista da Proposição 1 e de (MORÉ; SORENSEN, 1983, Lema 4.10).

Note que a existência de um ponto de acumulação \mathbf{x}^* não é garantida pela Proposição 1, apesar de ser razoavelmente provável. De fato, esse tipo de resultado aparenta ser o melhor possível sem a inclusão da hipótese sobre continuidade de Lipschitz do gradiente, caso de interesse dos autores de (KANZOW; MEHLITZ, 2021) que trabalhavam com funções para as quais não se tinha essa garantia. Isso possui consequência direta no enunciado do próximo resultado, no qual é necessário assumir a existência de subsequência convergente.

Por fim, com as ferramentas para a obtenção do resultado principal em mãos, as alterações em Hipótese 2 evitam novamente a necessidade de continuidade de h em dom h presente no teorema equivalente (KANZOW; MEHLITZ, 2021, Teorema 4.1).

Teorema 1. Considere a Hipótese 1 e a Hipótese 2 válidas. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 1 e $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para algum ponto \mathbf{x}^* . Então $\mathbf{x}^{k+1} \rightarrow_K \mathbf{x}^*$ e $\exists \{\boldsymbol{\eta}^k\} \subset \mathbb{X}$ tal que $\boldsymbol{\eta}^k \rightarrow_K 0$ e $\boldsymbol{\eta}^k \in \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) + \hat{\partial}h(\mathbf{x}^{k+1}) \ \forall k \in \mathbb{N}$. Além disso, caso ∇f seja localmente Lipschitz contínua em torno de \mathbf{x}^* ou h contínua em \mathbf{x}^* , então \mathbf{x}^* é, em adição, um ponto M-estacionário de (P).

Demonstração. Tomando o limite $k \to_K \infty$ em (2.10) respeitando a semicontinuidade inferior de h fornece $F(\mathbf{x}^*) \leq F(\mathbf{x}^0)$, e visto que $\mathbf{x}^0 \in \text{dom } h$, tem-se $\mathbf{x}^* \in \text{dom } h$.

A propriedade de minimização de \mathbf{x}^{k+1} de (2.2) com γ_k , o princípio de Fermat e a regra da soma (1.2) implicam

$$0 \in \nabla f(\mathbf{x}^{k}) + \frac{1}{\gamma_{k}}(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^{k+1})$$

$$\iff \boldsymbol{\eta}^{k} \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k}) - \frac{1}{\gamma_{k}}(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k}) \in \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^{k+1}).$$
(2.27)

Caso $\exists K' \subset K$ tal que $\gamma_k \to_{K'} 0$, o Lema 3 garante $\frac{1}{\gamma_k} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) \to_{K'} 0$. Logo $\frac{1}{\gamma_k} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) \to_K 0$ como um todo, uma vez que $\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \to_K 0$ pela Proposição 1.

Dessa forma, a primeira parte do teorema segue diretamente de (2.27) e da continuidade de ∇f e de $\mathbf{x}^{k+1} \rightarrow_K \mathbf{x}^*$, também da Proposição 1.

Resta provar então que $F(\mathbf{x}^{k+1}) \to_K F(\mathbf{x}^*)$, de modo que tomar o limite $k \to_K \infty$ na relação (2.27) resulte em $0 \in \nabla f(\mathbf{x}^*) + \partial h(\mathbf{x}^*)$ pela definição do subdiferencial.

A relação $f(\mathbf{x}^{k+1}) \to_K f(\mathbf{x}^*)$ segue imediatamente da continuidade de f e a já mencionada convergência $\mathbf{x}^{k+1} \to_K \mathbf{x}^*$. Basta mostrar então que $h(\mathbf{x}^{k+1}) \to_K h(\mathbf{x}^*)$. Se h é contínua em \mathbf{x}^* , o resultado é direto.

Permanece o caso no qual h é somente semicontínua inferior, porém ∇f é localmente Lipschitz contínua. Pela semicontinuidade inferior de h, tem-se

$$h(\mathbf{x}^*) \leq \liminf_{k \to K^{\infty}} h(\mathbf{x}^{k+1}) \leq \limsup_{k \to K^{\infty}} h(\mathbf{x}^{k+1}).$$
(2.28)

Além disso, \mathbf{x}^{k+1} resolve (2.2) com γ_k , o que implica

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\mathbf{x}^{k+1}) \\ \leqslant \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k\|^2 + h(\mathbf{x}^*)$$
 $\forall k \in K.$

Tomando agora o limite superior em K em ambos os lados e usando a continuidade de ∇f , as convergências $\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \to_K 0$ bem como $\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \to_K 0$ e pela limitação de $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_K$ do Lema 4, obtém-se $\limsup_{k \to K^{\infty}} h(\mathbf{x}^{k+1}) \leq h(\mathbf{x}^*)$. Em vista de (2.28), segue finalmente que $h(\mathbf{x}^{k+1}) \to_K h(\mathbf{x}^*)$ como se pretendia mostrar, completando assim a prova.

Esses resultados são relativamente moderados se comparados à de outros métodos semelhantes devido à ausência da continuidade de Lipschitz global de ∇f nas hipóteses. Entretanto, essas são aparentemente as deduções mais úteis que a teoria introduzida em (KANZOW; MEHLITZ, 2021) permite nesse momento. Em particular, apesar da Proposição 1 demonstrar que os iterados ficam infinitamente próximos e, portanto, convergência é provável, não há garantia de fato. Dessa forma, se faz necessária a suposição de existência de uma subsequência convergente no Teorema 1.

Observação 4. Seguindo o raciocínio da Observação 3, um ponto de acumulação \mathbf{x}^* ser isolado (e, portanto, a sequência como um todo convergir para ele) ocorre, por exemplo, quando ele é um mínimo local estrito, logo um ponto estacionário isolado. Isso se deve ao Teorema 1 que garante que todo ponto de acumulação deve ser estacionário. Desse modo, convergência total da sequência é garantida caso h seja convexa, $f \in C^2$ (duas vezes continuamente diferenciável) e $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ definida positiva.

2.2 Gradiente proximal não monótono acelerado

No artigo (LI; LIN, 2015) é apresentado um método que incorpora estratégias de aceleração de Nesterov e uma busca com condição de decréscimo não monótona Hager-Zhang (HZ) (ZHANG; HAGER, 2004). Essa estratégia calcula um candidato a novo iterado \mathbf{z}^k , além de uma variável de monitoramento \mathbf{v}^k que é utilizada quando esse candidato principal \mathbf{z}^k não satisfaz uma condição de decréscimo com respeito a $\{F(\mathbf{x}^k)\}$. O vetor \mathbf{v}^k , por sua vez, é obtido via um passo proximal a partir do iterado anterior, como no NPG.

Algorithm 2 Accelerated Nonmonotone Proximal Gradient method (ANPG) **Input:** $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{X}, \ \gamma_{\min} > \gamma_{\min} > 0, \ \alpha_{\max} > \alpha_{\min} > 0, \ m, n \in \mathbb{N}, \ \delta, \beta, \tau, \rho \in (0, 1) \ \text{and} \ U \gg F(\mathbf{x}^0)$ **Output:** Last \mathbf{x}^{k+1} computed or \mathbf{x}^{best} 1: Initialize $k \coloneqq 0$, $t_{-1} = t_0 \coloneqq 1$ and $\mathbf{z}^0 = \mathbf{x}^{-1} \coloneqq \mathbf{x}^0$ 2: repeat $\mathbf{y}^k \leftarrow \mathbf{x}^k + \frac{t_{k-1}}{t_k} (\mathbf{z}^k - \mathbf{x}^k) + \frac{t_{k-1} - 1}{t_k} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1})$ 3: 4: if $F(\mathbf{y}^k) \leq U$ (2.29)then $\alpha_k \leftarrow \alpha_{k,i}$ and $\mathbf{z}^{k+1} \leftarrow \mathbf{z}^{k,i}$ as computed by Algoritmo 3 5:6: else $\mathbf{y}^k \leftarrow \mathbf{x}^k, \, \mathbf{z}^{k+1} \leftarrow \mathbf{x}^k \text{ and go to } 10$ 7: 8: end if 9: if $F(\mathbf{z}^{k+1}) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{k, m-1\}} F(\mathbf{x}^{k-j}) - \frac{\beta}{2\alpha_k} \|\mathbf{z}^{k+1} - \mathbf{y}^k\|^2$ (2.30)then 10: $\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{z}^{k+1}$ (2.31)11: $\gamma_k \leftarrow \gamma_{k,i}$ and $\mathbf{v}^{k+1} \leftarrow \mathbf{v}^{k,i}$ as computed by Algoritmo 4 12:13: $\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \begin{cases} \mathbf{z}^{k+1}, & \text{if } F(\mathbf{z}^{k+1}) \leqslant F(\mathbf{v}^{k+1}), \\ \mathbf{v}^{k+1}, & \text{otherwise} \end{cases}$ (2.32)14: end if $t_{k+1} \leftarrow \frac{\sqrt{4t_k^2 + 1} + 1}{4t_k^2 + 1} + 1$ 15:16: $k \leftarrow k + 1$ 17: until A suitable termination criterion is violated at iteration k

O ANPG utiliza-se dessas mesmas ideias, com algumas modificações para a adequação da nossa teoria de convergência. Mais precisamente, a versão aqui presente reutiliza o critério GLL do NPG, ao invés do HZ.

Na obtenção de ambos $\mathbf{z}^k \in \mathbf{v}^k$ são implementadas buscas lineares não monótonas com respeito a $\{F(\mathbf{y}^k)\} \in \{F(\mathbf{x}^k)\}$, respectivamente. O tamanho de passo inicial é novamente livre com salvaguardas, o que fornece ao esquema a mesma flexibilidade presente no NPG. As sub-rotinas para a obtenção desses candidatos podem ser conferidas no Algoritmo 3 e no Algoritmo 4, e o esquema completo no Algoritmo 2. Já \mathbf{x}^{best} é definido como em (2.3) para a sequência gerada por esse algoritmo, e novamente sua obtenção será omitida do esquema, uma vez que também não interfere com os resultados.

Algorithm 3 Subroutine for $\overline{\mathbf{z}^{k+1}}$

Input: $\mathbf{y}^k \in \mathbb{X}, \ \alpha_{\max} > \alpha_{\min} > 0, \ n \in \mathbb{N}, \ \beta, \rho \in (0, 1) \ \text{and} \ F(\mathbf{y}^{l(k)})$ **Output:** α_k and \mathbf{z}^{k+1} 1: Choose $\alpha_{k,0} \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ 2: Initialize $i \coloneqq 0$ 3: while $F(\mathbf{z}^{k,i}) > \max_{0 \le j \le \min\{k,n-1\}} F(\mathbf{y}^{k-j}) - \frac{\beta}{2\alpha_{k,i}} \|\mathbf{z}^{k,i} - \mathbf{y}^k\|^2$ (2.33)where

$$\mathbf{z}^{k,i} \in \operatorname{prox}_{\alpha_{k,i}h} \left(\mathbf{y}^k - \alpha_{k,i} \nabla f(\mathbf{y}^k) \right)$$
 (2.34)

do 4: $\alpha_{k,i+1} \leftarrow \rho \alpha_{k,i}$ $i \leftarrow i + 1$ 5: 6: end while 7: $\alpha_k \leftarrow \alpha_{k,i}$ and $\mathbf{z}^{k+1} \leftarrow \mathbf{z}^{k,i}$

Algorithm 4 Subroutine for \mathbf{v}^{k+1}

Input: $\mathbf{x}^k \in \mathbb{X}, \ \gamma_{\max} > \gamma_{\min} > 0, \ m \in \mathbb{N}, \ \delta, \tau \in (0, 1) \ \text{and} \ F(\mathbf{x}^{l(k)})$ **Output:** γ_k and \mathbf{v}^{k+1}

1: Choose $\gamma_{k,0} \in [\gamma_{\min}, \gamma_{\max}]$ 2: Initialize $i \coloneqq 0$ 3: while

$$F(\mathbf{v}^{k,i}) > \max_{0 \le j \le \min\{k,m-1\}} F(\mathbf{x}^{k-j}) - \frac{\delta}{2\gamma_{k,i}} \|\mathbf{v}^{k,i} - \mathbf{x}^k\|^2$$
(2.35)

where

$$\mathbf{v}^{k,i} \in \operatorname{prox}_{\gamma_{k,i}h} \left(\mathbf{x}^k - \gamma_{k,i} \nabla f(\mathbf{x}^k) \right)$$
(2.36)

do 4: $\gamma_{k,i+1} \leftarrow \tau \gamma_{k,i}$ $i \leftarrow i + 1$ 5: 6: end while 7: $\gamma_k \leftarrow \gamma_{k,i}$ and $\mathbf{v}^{k+1} \leftarrow \mathbf{v}^{k,i}$

A importância do monitoramento com gradiente proximal convencional se dá em casos não convexos e não suaves. No método APG/FISTA introduzido em (BECK; TEBOULLE, 2009a) primeiramente extrapola-se un ponto \mathbf{y}^k a partir dos iterados atual e anterior por meio de um termo de inércia de magnitude específica, seguido então por um passo proximal a partir desse \mathbf{y}^k .

Ao estender o APG para o caso não convexo, a principal dificuldade reside justamente nessa sequência auxiliar, uma vez que o valor $F(\mathbf{y}^k)$ acaba não possuindo nenhum tipo de controle. Na realidade, $F(\mathbf{y}^k)$ não é correlacionado à sequência principal $F(\mathbf{x}^k)$, e pode ser arbitrariamente maior que esses valores quando \mathbf{y}^k é uma extrapolação ruim. Um exemplo extremo disso é quando h é a função indicadora de um conjunto ao qual \mathbf{y}^k não pertence. No geral, esses fenômenos ocorrem especialmente se F possui

comportamento oscilatório (LI; LIN, 2015). Quando um candidato é então calculado a partir de um \mathbf{y}^k ruim, ele também pode possuir valor de função arbitrariamente maior que aqueles dos iterados anteriores.

Mesmo empregando estratégias de busca linear a partir de \mathbf{y}^k esse problema não é solucionado, pois exigir decréscimo suficiente com relação aos valores da sequência principal $\{F(\mathbf{x}^k)\}$ pode resultar em buscas sem garantia de terminação, sendo, portanto, somente viáveis buscas com relação aos valores da própria $\{F(\mathbf{y}^k)\}$. Para solucionar esse problema, em (LI; LIN, 2015) surge a ideia de introduzir uma sequência paralela para monitorar e corrigir o passo a partir de \mathbf{y}^k quando esse falha segundo um critério com base na sequência principal.

2.2.1 Resultados de convergência

Ao longo do restante desta seção, quando utilizado em $\mathbf{y}^{l(k)}$, $l(k) \ \forall k \in \mathbb{N}$ também será entendido como um índice em $\{k - \min\{k, n - 1\}, \dots, k\}$ tal que $F(\mathbf{y}^{l(k)}) = \max_{0 \leq j \leq \min\{k,n\}} F(\mathbf{y}^{k-j})$, analogamente à sua definição anterior. Também serão introduzidos os conjuntos $\Omega_1 := \{k_1, k_2, \dots, k_j, \dots\}$ e $\Omega_2 := \{l_1, l_2, \dots, l_j, \dots\}$ tais que, no Algoritmo 2, $\forall k \in \Omega_1$ seja executado (2.31) na iteração $k \in \forall k \in \Omega_2$ seja executado (2.32) na iteração k.

O seguinte resultado de boa definição pode ser imediatamente derivado.

Lema 5. Considere a Hipótese 1 (b) válida e uma iteração fixa k do Algoritmo 2. Suponha que \mathbf{y}^k não seja um ponto M-estacionário do problema (P). Então a condição (2.33) do Algoritmo 3 é satisfeita em um número finito de iterações, ou seja, tem-se $\alpha_k = \alpha_{k,i_k}$ para algum índice finito $i_k \in \{0, 1, 2, ...\}$. O mesmo vale se \mathbf{x}^k não for M-estacionário para a condição (2.35) do Algoritmo 4 em uma iteração fixa $k \in \Omega_2$, ou seja, tem-se $\gamma_k = \gamma_{k,i_k}$ para algum índice finito $i_k \in \{0, 1, 2, ...\}$.

Demonstração. A demonstração para (2.33) é idêntica à do Lema 1, substituindo $\mathbf{x}^{k,i}$ por $\mathbf{z}^{k,i}$, \mathbf{x}^k por \mathbf{y}^k , γ por $\alpha \in \delta$ por β , e (2.2) por (2.34). O mesmo vale para (2.35), substituindo agora somente $\mathbf{x}^{k,i}$ por $\mathbf{v}^{k,i}$, e (2.2) por (2.36).

Os próximos dois resultados são também facilmente herdados do NPG. Ambos assumem implicitamente que o ANPG gera uma sequência infinita de iterados.

Lema 6. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2. Então $\{F(\mathbf{x}^{l(k)})\}$ decresce monotonicamente.

Demonstração. Note que de (2.35) e (2.32), segue que

$$F(\mathbf{x}^{k+1}) \leqslant F(\mathbf{v}^{k+1}) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(k)}) - \frac{\delta}{2\gamma_k} \|\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \quad \forall k \in \Omega_2.$$
(2.37)
Logo, juntamente com (2.30) e (2.31), tem-se que, independentemente da escolha de \mathbf{x}^{k+1} no esquema algorítmico,

$$F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq F(\mathbf{x}^{l(k)}) - c_k \leq F(\mathbf{x}^{l(k)})$$

para algum $c_k>0.$ A demonstração é, então, análoga à do Lema 2.

O próximo corolário introduz um resultado secundário para $\{\mathbf{y}^k\}$ importante para o lema a seguir.

Corolário 2. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Sejam $\{\mathbf{x}^k\}$ e $\{\mathbf{y}^k\}$ sequências geradas pelo Algoritmo 2. Então $\{\mathbf{x}^k\} \subset \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$ e $\{\mathbf{y}^k\} \subset \mathcal{L}_U(F)$.

Demonstração. Obviamente $\mathbf{x}^0 \in \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F)$ por definição. Já para k > 0, como por construção l(0) = 0, pelo Lema 6 segue que

$$F(\mathbf{x}^k) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(k-1)}) \leqslant F(\mathbf{x}^{l(0)}) \leqslant F(\mathbf{x}^0),$$
(2.38)

isso é, $\{\mathbf{x}^k\} \subset \mathcal{L}_{F(\mathbf{x}^0)}(F).$

Caso (2.29) seja satisfeita, é trivial que $\mathbf{y}^k \in \mathcal{L}_U(F)$. Além disso, se \mathbf{y}^k viola (2.29) para um k fixo, então $\mathbf{y}^k \leftarrow \mathbf{x}^k$, e como $U \gg F(\mathbf{x}^0)$ e por (2.38), $F(\mathbf{y}^k) = F(\mathbf{x}^k) \ll U$. Portanto, segue que $\{\mathbf{y}^k\} \subset \mathcal{L}_U(F)$.

Com as mudanças na estrutura do método, faz-se necessário dividir o Lema 3 em duas partes.

Lema 7. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2 e $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para um ponto \mathbf{x}^* tal que $\alpha_k \rightarrow_{K'} 0$ para alguma subsequência $K' \subset K$. Então vale que $\frac{1}{\alpha_k} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k\| \rightarrow_{K'} 0$. Além disso, $\frac{1}{\gamma_k} \|\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \rightarrow_{K'} 0$ 0 também vale caso $\gamma_k \rightarrow_{K'} 0$ para alguma subsequência $K' \subset K \cap \Omega_2$.

Demonstração. A demonstração para $\frac{1}{\alpha_k} \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k \| \to_{K'} 0$ é idêntica à do Lema 3, utilizando o Corolário 2 ao invés do Corolário 1, e substituindo $\hat{\mathbf{x}}^k$ por $\hat{\mathbf{z}}^k$, \mathbf{x}^k por \mathbf{y}^k , \mathbf{x}^{k+1} por \mathbf{z}^{k+1} , $F(\mathbf{x}^0)$ por U, γ por α , τ por $\rho \in \delta$ por β , e (2.2) por (2.34) e (2.1) por (2.33).

O mesmo vale para $\frac{1}{\gamma_k} \| \mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^k \| \to_{K'} 0$, substituindo agora somente K por $K \cap \Omega_2$, $\hat{\mathbf{x}}^k$ por $\hat{\mathbf{v}}^k$, \mathbf{x}^{k+1} por \mathbf{v}^{k+1} , e (2.2) por (2.36) e (2.1) por (2.35).

Também é resgatado o seguinte resultado para cada tamanho de passo em suas respectivas subsequências.

Lema 8. Considere a Hipótese 1 (b) válida. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2, $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para um ponto \mathbf{x}^* e suponha que ∇f é localmente Lipschitz contínua em torno de \mathbf{x}^* . Então $\left\{\frac{1}{\alpha_k}\right\}_K$ e $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_{K \cap \Omega_2}$ são limitadas.

Demonstração. A demonstração para $\left\{\frac{1}{\alpha_k}\right\}_K$ é idêntica à do Lema 4, utilizando o Lema 7 ao invés do Lema 3, e substituindo $\hat{\mathbf{x}}^k$ por $\hat{\mathbf{z}}^k$, \mathbf{x}^k por \mathbf{y}^k , γ por α e δ por β . O mesmo vale caso $\left\{\frac{1}{\gamma_k}\right\}_{K \cap \Omega_2}$ seja infinita, substituindo agora somente K por $K \cap \Omega_2$, k por l e $\hat{\mathbf{x}}^k$ por $\hat{\mathbf{v}}^k$. Se ao invés $K \cap \Omega_2$ for finita, o resultado é imediato do Lema 5, visto que $0 < \gamma_{\min} \leq \gamma_{l,0}$.

A próxima proposição possui menos utilidade por si só que sua contraparte NPG, que garante $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \to 0$. A introdução da sequência a partir de \mathbf{y}^k impossibilita o mesmo resultado. Contudo, algo análogo pode ser obtido para as distâncias entre \mathbf{x}^{k+1} e \mathbf{y}^k em Ω_1 e \mathbf{v}^{k+1} e \mathbf{x}^k em Ω_2 . Esses resultados serão úteis no teorema de convergência principal do ANPG.

Proposição 2. Considere a Hipótese 1 e a Hipótese 2 válidas. Então a sequência $\{\mathbf{x}^k\}$ gerada pelo Algoritmo 2 satisfaz $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k\| \rightarrow_{\Omega_1} 0$, $e \|\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \rightarrow_{\Omega_2} 0$ caso Ω_2 seja infinita.

Demonstração. De (2.30) e (2.31) tem-se

$$F(\mathbf{x}^{l(k)}) - F(\mathbf{x}^{l(l(k)-1)}) = F(\mathbf{z}^{l(k)}) - F(\mathbf{x}^{l(l(k)-1)}) \leqslant -\frac{\beta}{2\alpha_{l(k)-1}} \left\| \mathbf{d}_{\mathbf{y}}^{l(k)-1} \right\|^2 \leqslant 0 \quad \forall l(k) \in \Omega_1,$$
(2.39)

sendo $\mathbf{d}_{\mathbf{y}}^k\coloneqq\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{y}^k\;\forall k\in\mathbb{N}.$ Além disso, de (2.37) tem-se

$$F(\mathbf{x}^{l(k)}) - F(\mathbf{x}^{l(l(k)-1)}) \leqslant -\frac{\delta}{2\gamma_{l(k)-1}} \left\| \mathbf{d}_{\mathbf{v}}^{l(k)-1} \right\|^2 \leqslant 0 \quad \forall l(k) \in \Omega_2,$$
(2.40)

sendo $\mathbf{d}_{\mathbf{v}}^k \coloneqq \mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^k \ \forall k \in \Omega_2.$

Assumindo que $\lim_{k \to \Omega_1 \infty} \mathbf{d}_{\mathbf{y}}^k \neq 0$ ou $\lim_{k \to \Omega_2 \infty} \mathbf{d}_{\mathbf{v}}^k \neq 0$, tome $K \subset \Omega_1$ ou Ω_2 (conforme o que será provado) como sendo uma subsequência que se mantém afastada de 0 como em (2.16), substituindo \mathbf{d} por $\mathbf{d}_{\mathbf{y}}$ ou $\mathbf{d}_{\mathbf{v}}$ como apropriado.

Começando com $K^+ := \{k + \max\{m, n\} \mid k \in K\}$, é preciso tomar uma subsequência $K^{+'}$ dentre $K^+ \cap \{k \mid k \in K^+, l(k) \in \Omega_1\}$ e $K^+ \cap \{k \mid k \in K^+, l(k) \in \Omega_2\}$ que seja infinita e usar (2.39) ou (2.40) com relação a essa escolha. Note que por definição e pela construção do Algoritmo 2, sempre há ao menos uma dessas subsequências infinita. A escolha do Ω em $K^{+'}$ pode diferir do Ω no qual o K inicial está contido. Após isso, defina $K^* \subset K^{+'}$ como na Proposição 1 e é demonstrado (2.19) para $\mathbf{d}_{\mathbf{y}}^{l(k)-1}$ ou $\mathbf{d}_{\mathbf{v}}^{l(k)-1}$ (conforme a subsequência $K^{+'}$ escolhida). Também são diretamente demonstrados (2.21) e (2.25), com as substituições apropriadas. Se ambos $K^+ \cap \{k \mid k \in K^+, l(k) \in \Omega_1\}$ e $K^+ \cap \{k \mid k \in K^+, l(k) \in \Omega_2\}$ forem infinitas, os mesmos procedimentos precisam ser efetuados em ambas as subsequências para que ao final da demonstração o limite das distâncias desejadas no K inicial ao todo seja demonstrado nulo, ao invés de só um limite em subsequência.

A indução então terá que ser feita em uma subsequência dentre $\{k \in K^* \mid l(k) - j \in \Omega_1\}$ e $\{k \in K^* \mid l(k) - j \in \Omega_2\}$ que seja infinita, continuando a usar a notação K^* por simplicidade. Novamente, essas subsequências não precisam usar a mesma sequência Ω que as demais ou aquela na qual o K inicial está contido, e se ambas forem infinitas, os procedimentos a seguir devem ser efetuados em ambas pelos mesmos motivos anteriores. Com as devidas substituições, é então provado que $\exists K^* \subset K^+$ tal que $\forall j \in \mathbb{N} \text{ com } j \ge 1$

$$\lim_{k \to K^* \infty} f(\mathbf{x}^{l(k)-j}) = f^*, \quad \lim_{k \to K^* \infty} h(\mathbf{x}^{l(k)-j}) = h^*, \tag{2.41}$$

sendo $F^* \coloneqq f^* + h^*$, e

$$\lim_{k \to K^* \infty} \mathbf{d}_{\mathbf{y}}^{l(k)-j} = 0$$

se $\{l(k) - j\}_{K^*} \subset \Omega_1$ ou

$$\lim_{k \to_{K^*} \infty} \mathbf{d}_{\mathbf{v}}^{l(k)-j} = 0$$

se $\{l(k) - j\}_{K^*} \subset \Omega_2$, intercalando o conjunto Ω conforme necessário. Esse resultado só é possível porque a demonstração por indução para l(k) - j - 1 independe do índice posterior para o qual a hipótese é assumida válida, l(k) - j, pertencer a Ω_1 ou Ω_2 , e sim somente de (2.41).

O restante da prova é direto, com $K' = \{k - \max\{m, n\} \mid k \in K^*\}$ e a contradição final seguindo o mesmo raciocínio da Proposição 1, usando $\mathbf{d}_{\mathbf{y}}$ ou $\mathbf{d}_{\mathbf{v}}$ apropriadamente para o que está sendo provado.

Finalmente, é resgatado o teorema de convergência principal para o ANPG.

Teorema 2. Considere a Hipótese 1 e a Hipótese 2 válidas. Seja $\{\mathbf{x}^k\}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2 e $\{\mathbf{x}^k\}_K$ uma subsequência convergindo para algum ponto \mathbf{x}^* . Caso em K a atualização $\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{z}^{k+1}$ (2.31) seja executada infinitas vezes ou $\mathbf{x}^k \leftarrow \mathbf{v}^k$ em (2.32) infinitas vezes, então $\exists K' \subset K$ e $\{\mathbf{u}^k\}_{K'}, \{\boldsymbol{\eta}^k\}_{K'} \subset \mathbb{X}$ tais que $\mathbf{u}^k \to \mathbf{x}^*, \, \boldsymbol{\eta}^k \to \mathbf{0}$ e $\boldsymbol{\eta}^k \in \nabla f(\mathbf{u}^k) + \partial h(\mathbf{u}^k) \, \forall k \in K'$. Além disso, caso ∇f seja localmente Lipschitz contínua em torno de \mathbf{x}^* ou h contínua em \mathbf{x}^* , então \mathbf{x}^* é um ponto M-estacionário de (P).

Demonstração. Novamente note que pela construção do Algoritmo 2 e as definições de Ω_1 e Ω_2 , ao menos uma dentre as subsequências $K \cap \Omega_1$ e $K \cap \Omega_2$ deve ser infinita. Esse fato não será mais repetido para subsequências futuras.

Tome $K' = K \cap \Omega_2$ caso essa seja infinita. A propriedade de minimização de \mathbf{v}^{k+1} de (2.36) com γ_k , o princípio de Fermat e a regra da soma (1.2) implicam

$$0 \in \nabla f(\mathbf{x}^{k}) + \frac{1}{\gamma_{k}}(\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^{k}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{v}^{k+1})$$

$$\iff \boldsymbol{\eta}^{k} \coloneqq \nabla f(\mathbf{v}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k}) - \frac{1}{\gamma_{k}}(\mathbf{v}^{k+1} - \mathbf{x}^{k}) \in \nabla f(\mathbf{v}^{k+1}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{v}^{k+1}).$$
(2.42)

Tome também $\{\mathbf{u}^k\}_{K'} = \{\mathbf{v}^{k+1}\}_{K'} \in \boldsymbol{\eta}^k$ como definido acima. A demonstração então é semelhante à do Teorema 1, utilizando os resultados apropriados dessa seção ao invés de suas contrapartes para o Algoritmo 1, e fazendo as substituições apropriadas de notação como nas demonstrações anteriores.

Caso $K \cap \Omega_2$ seja finita, tem-se que $K \cap \Omega_1$ é infinita. Tome, se existir, uma subsequência infinita $K' \subset K \cap \Omega_1$ tal que $k - 1 \in \Omega_1 \ \forall k \in K'$. Como então $\mathbf{x}^k = \mathbf{z}^k$ pela definição de Ω_1 e (2.31), a propriedade de minimização de \mathbf{x}^k de (2.34) com α_{k-1} dessa vez implica

$$0 \in \nabla f(\mathbf{y}^{k-1}) + \frac{1}{\alpha_{k-1}}(\mathbf{x}^k - \mathbf{y}^{k-1}) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^k)$$

$$\iff \boldsymbol{\eta}^k \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{y}^{k-1}) - \frac{1}{\alpha_{k-1}}(\mathbf{x}^k - \mathbf{y}^{k-1}) \in \nabla f(\mathbf{x}^k) + \widehat{\partial}h(\mathbf{x}^k).$$
(2.43)

Tome então $\{\mathbf{u}^k\}_{K'} = \{\mathbf{x}^k\}_{K'} \in \boldsymbol{\eta}^k$ como definido acima. Repare que caso $\exists K'' \subset K'$ tal que $\alpha_{k-1} \to_{K''} 0$, então $\frac{1}{\alpha_{k-1}} (\mathbf{x}^k - \mathbf{y}^{k-1}) \to_{K''} 0$ pelo Lema 7 com k substituído por k-1, e relembrando que $k-1 \in \Omega_1 \ \forall k \in K'$ por construção e $\mathbf{x}^k \to_{K'} \mathbf{x}^*$ já que $K' \subset K$. Logo $\frac{1}{\alpha_{k-1}} (\mathbf{x}^k - \mathbf{y}^{k-1}) \to_{K'} 0$ como um todo uma vez que $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{y}^{k-1}\| \to_{K'} 0$ pela Proposição 2 (novamente substituindo k por k-1). A demonstração então é semelhante à do Teorema 1 com as substituições adequadas, em especial utilizando (2.43) no lugar de (2.27).

Caso não exista tal subsequência, por exclusão $\exists K^* \subset K \cap \Omega_1$ infinita tal que $k - 1 \in \Omega_2 \ \forall k \in K^*$. De (2.32) existem duas possibilidades, $\mathbf{x}^k = \mathbf{z}^k$ ou $\mathbf{x}^k = \mathbf{v}^k$. O caso em que somente $K' = \{k \in K^* \mid \mathbf{x}^k = \mathbf{z}^k\}$ é infinita ainda não possui demonstração.

Tome $K' = \{k \in K^* \mid \mathbf{x}^k = \mathbf{v}^k\}$ caso seja infinita. A propriedade de minimização de \mathbf{x}^k de (2.36) com γ_{k-1} desta vez implica

$$0 \in \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}) + \frac{1}{\gamma_{k-1}} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) + \widehat{\partial} h(\mathbf{x}^k)$$

$$\iff \boldsymbol{\eta}^k \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}) - \frac{1}{\gamma_{k-1}} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) \in \nabla f(\mathbf{x}^k) + \widehat{\partial} h(\mathbf{x}^k).$$
(2.44)

Tome também $\{\mathbf{u}^k\}_{K'} = \{\mathbf{x}^k\}_{K'} \in \boldsymbol{\eta}^k$ como definido acima. A demonstração novamente é semelhante à do Teorema 1 com as devidas substituições, em especial utilizando (2.44) no lugar de (2.27). Novamente $\frac{1}{\gamma_{k-1}}(\mathbf{v}^k - \mathbf{x}^{k-1}) \rightarrow_{K'} 0$ pois $\mathbf{v}^k = \mathbf{x}^k \rightarrow_{K'} \mathbf{x}^*$ dado que $K' \subset K$ e novamente pela Proposição 2 com transladação de índice e usando que $k - 1 \in \Omega_2 \ \forall k \in K'$.

Observação 5. O caso em que somente $K \cap \Omega_1$ é infinita e não existe subsequência infinita $K' \subset K \cap \Omega_1$ tal que $k - 1 \in \Omega_1$ ou $k - 1 \in \Omega_2$ e $\mathbf{x}^k = \mathbf{v}^k \ \forall k \in K'$, apesar de parecer específico, ainda precisa ser tratado, possivelmente com alguma modificação no Algoritmo 2. Por exemplo, substituir (2.32) por $\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{v}^{k+1}$ eliminaria esse caso, porém é uma modificação potencialmente negativa para a eficiência do método, visto que a atualização atual (2.32) é basicamente de graça (se \mathbf{z}^{k+1} e $F(\mathbf{z}^{k+1})$ estiverem salvos à disposição) e força iterados com valores melhores.

Outra alternativa é construir um contraexemplo para esse caso no qual o limite **x**^{*} não é M-estacionário, demonstrando assim que o Teorema 2 está completo e nada mais pode ser afirmado sem hipóteses adicionais.

Outro resultado similar pode ser derivado para as sequências $\{\mathbf{y}^k\} \in \{\mathbf{v}^k\}_{\Omega_2}$.

Corolário 3. Considere a Hipótese 1 e a Hipótese 2 válidas. Seja $\{\mathbf{y}^k\}$ ou $\{\mathbf{v}^{k+1}\}_{\Omega_2}$ uma sequência gerada pelo Algoritmo 2 e $\{\mathbf{y}^k\}_{K\cap\Omega_1}$ ou $\{\mathbf{v}^{k+1}\}_{K\cap\Omega_2}$ uma subsequência convergindo para algum ponto \mathbf{x}^* . Então $\exists \{\mathbf{u}^k\}_{K\cap\Omega_1}, \{\boldsymbol{\eta}^k\}_{K\cap\Omega_1} \subset \mathbb{X}$ ou $\{\mathbf{u}^k\}_{K\cap\Omega_2}, \{\boldsymbol{\eta}^k\}_{K\cap\Omega_2} \subset \mathbb{X},$ respectivamente, tais que $\mathbf{u}^k \to \mathbf{x}^*, \ \boldsymbol{\eta}^k \to \mathbf{0}$ e $\boldsymbol{\eta}^k \in \nabla f(\mathbf{u}^k) + \partial h(\mathbf{u}^k) \ \forall k \in K \cap \Omega_1$ ou $\forall k \in K \cap \Omega_2$. Além disso, caso ∇f seja localmente Lipschitz contínua em torno de \mathbf{x}^* ou h contínua em \mathbf{x}^* , então \mathbf{x}^* é um ponto M-estacionário de (P).

Demonstração. Para $\mathbf{y}^k \to_{K \cap \Omega_1} \mathbf{x}^*$, como $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{z}^{k+1}$, a propriedade de minimização de \mathbf{x}^{k+1} de (2.34) com α_k implica

$$0 \in \nabla f(\mathbf{y}^k) + \frac{1}{\alpha_k} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k) + \widehat{\partial} h(\mathbf{x}^{k+1})$$
$$\iff \boldsymbol{\eta}^k \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{y}^k) - \frac{1}{\alpha_k} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}^k) \in \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) + \widehat{\partial} h(\mathbf{x}^{k+1}).$$

Tome então $\{\mathbf{u}^k\} = \{\mathbf{x}^{k+1}\} \in \boldsymbol{\eta}^k$ como definido acima e argumente como na demonstração do caso referente à (2.43), agora sem a necessidade de transladar os índices de k para k-1 na Proposição 2.

Já para $\mathbf{v}^{k+1} \rightarrow_{K \cap \Omega_2} \mathbf{x}^*$, basta tomar $\boldsymbol{\eta}^k$ como definido em (2.42) e $\{\mathbf{u}^k\}_{K \cap \Omega_2} = \{\mathbf{v}^{k+1}\}_{K \cap \Omega_2}$ e argumentar de forma semelhante.

Contudo, esse resultado adicional poderia ser omitido, dado que é uma consequência direta do resultado anterior e da Proposição 2.

Observação 6. Note que, pela Proposição 2, $\mathbf{y}^k \to_{K \cap \Omega_1} \mathbf{x}^* \implies \mathbf{x}^{k+1} \to_{K \cap \Omega_1} \mathbf{x}^* e$ $\mathbf{v}^{k+1} \to_{K \cap \Omega_2} \mathbf{x}^* \implies \mathbf{x}^k \to_{K \cap \Omega_2} \mathbf{x}^*$. Dessa forma, as hipóteses do Corolário 3 fornecem uma subsequência $\{\mathbf{x}^k\}_K$ convergindo para \mathbf{x}^* $(\{\mathbf{x}^{k+1}\}_{K \cap \Omega_1} \text{ ou } \{\mathbf{x}^k\}_{K \cap \Omega_2}, \text{ respectivamente})$ para a hipótese do Teorema 2, o que é outra alternativa de demonstração.

2.3 Gradiente proximal com passo espectral

Tendo em mãos os esquemas algorítmicos genéricos NPG e ANPG e suas respectivas teorias de convergência, uma gama de alternativas na escolha de passo inicial pode então ser explorada. Uma das possíveis vertentes, com um longo histórico na literatura de otimização tanto irrestrita quanto restrita, são as estratégias de passo espectrais. Essa alternativa possui grande potencial para investigação, uma vez que foi pouco abordada no contexto de métodos proximais (especialmente em problemas descontínuos).

Nessa subseção será brevemente resumida essa literatura, com enfoque em apresentar diferentes possibilidades para definir o tamanho de passo inicial. Também será apresentada na Subseção 2.3.1 a fundamentação em informações de segunda ordem por trás desses passos no contexto proximal e extensões dessa ideia que podem resultar em métodos práticos na Subseção 2.3.4.

O trabalho seminal (BARZILAI; BORWEIN, 1988) introduziu um método do gradiente para minimização de uma função quadrática convexa $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ (posteriormente estendido para o caso *n*-dimensional em (RAYDAN, 1993)) cuja iteração é caracterizada por

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \gamma_k^{BBR} \nabla f(\mathbf{x}^k) \quad \forall k \ge 1$$
(2.45)

em que γ^{BBR} é o tamanho de passo Barzilai-Borwein-Raydan (BBR) dado por

$$\gamma_k^{BBR} \coloneqq \frac{(\mathbf{s}^k)^T \mathbf{s}^k}{(\mathbf{s}^k)^T \mathbf{r}^k},\tag{2.46}$$

sendo $\mathbf{s}^k \coloneqq \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1} \in \mathbf{r}^k \coloneqq \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1})$. Esse esquema será aqui denominado de método BBR no contexto de funções quadráticas, porém outra denominação comum é método do gradiente espectral, e correspondentemente γ_k^{BBR} recebe o nome de tamanho de passo espectral (primal).

A estrutura de (2.45) é especialmente vantajosa quando são tratados problemas de larga escala. Cada iteração avalia um gradiente $\nabla f(\mathbf{x}^k)$ para usar como direção, $\nabla f(\mathbf{x}^{k-1})$ é armazenado da iteração anterior e as demais operações são de ordem $\mathcal{O}(n)$.

Outra alternativa clássica de esquema utilizando a direção do gradiente é o método de Cauchy, ou *Cauchy's steepest descent method* (CAUCHY, 1847), cujo tamanho de passo, dito exato, é definido como

$$\gamma_k^{SD} \coloneqq \underset{\gamma \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} f(\mathbf{x}^k - \gamma \nabla f(\mathbf{x}^k)).$$
(2.47)

Curiosamente, para $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$, (2.46) se reduz à

$$\gamma_k^{BBR} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}^{k-1})^T \nabla f(\mathbf{x}^{k-1})}{\nabla f(\mathbf{x}^{k-1})^T \mathbf{A} \nabla f(\mathbf{x}^{k-1})}$$

e (2.47) à

$$\gamma_k^{SD} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}^k)^T \nabla f(\mathbf{x}^k)}{\nabla f(\mathbf{x}^k)^T \mathbf{A} \nabla f(\mathbf{x}^k)},$$

isso é, γ_k^{BBR} é o mesmo que γ_{k-1}^{SD} . Portanto, o método BBR é análogo ao método de Cauchy com retardo de uma iteração no tamanho de passo. Essa relação inspirou futuramente o emprego de estratégias distintas de retardos.

O método de Cauchy converge linearmente, entretanto é altamente afetado por mal-condicionamento (AKAIKE, 1959; FORSYTHE, 1968). Especificamente, no caso quadrático estritamente convexo, ele converge para a solução com uma taxa de convergência Q-linear cujo fator tende a 1 quando o número de condição da Hessiana tende ao infinito. Isso se manifesta na prática por meio de um comportamento de zigue-zague da sequência $\{\mathbf{x}^k\}$ quando as curvas de nível da função são similares a elipsoides com excentricidade alta.

Para uma quadrática bidimensional estritamente convexa, o artigo (BARZILAI; BORWEIN, 1988) demonstrou convergência R-superlinear para o método BBR. Posteriormente, uma taxa R-linear para o caso *n*-dimensional foi demonstrada em (DAI, 2002) com um refinamento da teoria introduzida em (RAYDAN, 1993), que previamente estabeleceu convergência global. Convergência superlinear nesse mesmo caso, contudo, foi descartada em (FLETCHER, 1990).

Na prática, entretanto, foi observado que o passo espectral possui desempenho superior ao de Cauchy, exceto em casos excepcionais (RAYDAN, 1993). Com uma nova abordagem, o trabalho (LI; SUN, 2021) aperfeiçoou a estimativa de convergência para o método BBR e demonstrou que, no pior cenário, ele possui taxa teórica comparável à de Cauchy, assim reduzindo a discrepância entre teoria e prática.

Apesar dos resultados promissores do método BBR, seu emprego para minimização irrestrita genérica (não necessariamente quadrática) não foi imediato. O método apresenta recorrente e, em alguns casos, severa violação da monotonicidade da sequência de valores $\{f(\mathbf{x}^k)\}$, o que trouxe questionamentos sobre sua eficácia e convergência e desencorajou sua ampla disseminação.

Com o tempo, estratégias não monótonas foram gradualmente se popularizando, motivadas inicialmente pelo importante trabalho (GRIPPO; LAMPARIELLO; LUCIDI, 1986). Através desses resultados, convergência global não mais dependia de requerimentos de decréscimo em toda iteração.

Em (RAYDAN, 1997), essas novas ideias foram aproveitadas para o desenvolvimento de um método pautado em (2.45) e (2.46) globalmente convergente. O mesmo artigo demonstrou resultados numéricos que sugeriam que esse método, apesar de inferior ao *Conjugate Gradient method* (CG) (HESTENES; STIEFEL, 1952) para problemas quadráticos, é mais eficiente em problemas gerais. Em outras palavras, o passo (2.45) retém melhor suas qualidades fora de seu contexto de origem. Isso indicaria que, apesar de referência em problemas quadráticos, o método CG perde sua eficácia de forma substancial quando transportado para funções genéricas. Esse resultado surpreendente e promissor instigou o desenvolvimento de novas variações e aplicações de métodos com características espectrais.

2.3.1 Relação com métodos quasi-Newton

Métodos quasi-Newton para otimização irrestrita (DENNIS JR.; MORé, 1977) possuem a fórmula recursiva

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \tau_k \mathbf{H}_k^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k) \quad \forall k \ge 1,$$
(2.48)

na qual $\tau_k \in \mathbb{R}$ e a matriz \mathbf{H}^k aproxima a Hessiana $\nabla^2 f$ localmente ao satisfazer a chamada equação secante

$$\mathbf{H}_k \mathbf{s}^k = \mathbf{r}^k. \tag{2.49}$$

O ponto obtido por (2.48) com \mathbf{H}_k obedecendo (2.49) e $\tau_k = 1$ anula a aproximação afim que interpola ∇f entre $\mathbf{x}^{k-1} \in \mathbf{x}^k$, uma vez que

$$\nabla f(\mathbf{x}^{k-1}) + \mathbf{H}_k(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k-1}) = \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}) + \mathbf{H}_k(\underbrace{\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}}_{\mathbf{s}^k}) - 1 \cdot \mathbf{H}_k\mathbf{H}_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}.$$

A equação (2.49) por si só possui múltiplas soluções. A ideia por trás do método do gradiente espectral é restringir \mathbf{H}_k a uma estrutura simplificada com somente uma variável de decisão,

$$\mathbf{H}_k \coloneqq \mu_k \mathbf{I},\tag{2.50}$$

em que $\mu_k \in \mathbb{R}$. A equação (2.49) então se reduz à

$$\mu_k \mathbf{s}^k = \mathbf{r}^k$$

Em geral, essa equação não possui solução exata, sendo então aceita a solução de quadrados mínimos, isso é,

$$\mu_k = \underset{\mu \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} \left\| \mu \mathbf{s}^k - \mathbf{r}^k \right\|^2 = \frac{(\mathbf{s}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{s}^k)^T \mathbf{s}^k} = \frac{1}{\gamma_k^{BBR}}.$$
(2.51)

Além disso, é comum implementar salvaguardas para evitar o tamanho de passo γ_k^{BBR} negativo (o que ocorre quando a função objetivo é localmente não convexa) ou muito grande (como no Algoritmo 1).

Note que, pelo Teorema do valor médio para integrais,

$$\mathbf{r}^{k} = \left(\int_{0}^{1} \nabla^{2} f\left(\mathbf{x}^{k-1} + t\mathbf{s}^{k}\right) dt\right) \mathbf{s}^{k}.$$

Logo (2.51) é o coeficiente de Rayleigh de \mathbf{s}^k para a matriz Hessiana média,

$$\int_0^1 \nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{k-1} + t\mathbf{s}^k\right) dt,$$

entre \mathbf{x}^{k-1} e \mathbf{x}^k . Esse valor está entre os autovalores máximo e mínimo dessa matriz média, possuindo assim relação com o seu espectro, razão pela qual γ_k^{BBR} recebe o nome de tamanho de passo espectral.

Outra forma de escrever a equação secante (2.49) (também denominada forma primal) é na sua forma dual $\mathbf{B}_k \mathbf{r}^k = \mathbf{s}^k$, na qual \mathbf{B}_k agora aproxima localmente $[\nabla^2 f]^{-1}$. Dessa forma, (2.48) se torna

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \tau_k \mathbf{B}_k \nabla f(\mathbf{x}^k) \quad \forall k \ge 1.$$

Tomando $\mathbf{B}_k = \mu_k \mathbf{I}$ e seguindo os mesmos passos de (2.51) resulta agora no tamanho de passo espectral dual

$$\mu_k = \underset{\mu \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} \left\| \mu \mathbf{r}^k - \mathbf{s}^k \right\|^2 = \frac{(\mathbf{s}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{r}^k)^T \mathbf{r}^k} = \gamma_k^{BBR2}.$$
(2.52)

O método correspondente também possui convergência global para quadráticas estritamente convexas *n*-dimensionais, novamente provado em (RAYDAN, 1993). Esse tamanho é menor em módulo que o espectral primal, visto que, pela desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$\left[(\mathbf{s}^{k})^{T} \mathbf{r}^{k} \right]^{2} \leq \left| (\mathbf{s}^{k})^{T} \mathbf{s}^{k} \right| \left| (\mathbf{r}^{k})^{T} \mathbf{r}^{k} \right| \iff \left| \frac{(\mathbf{s}^{k})^{T} \mathbf{r}^{k}}{(\mathbf{r}^{k})^{T} \mathbf{r}^{k}} \right| \leq \left| \frac{(\mathbf{s}^{k})^{T} \mathbf{s}^{k}}{(\mathbf{s}^{k})^{T} \mathbf{r}^{k}} \right|.$$
(2.53)

Para otimização irrestrita, foi observado que γ_k^{BBR} é frequentemente superior à γ_k^{BBR2} , porém estratégias que utilizam alternadamente os dois passos encontraram certo sucesso no passado, seja no caso restrito quanto irrestrito (veja a Subseção 2.3.3).

2.3.2 Do gradiente espectral projetado ao gradiente espectral proximal

Considere o problema

$$\begin{array}{ll} \min & f(\mathbf{x}) \\ \text{s. a} & \mathbf{x} \in C, \end{array} \end{array}$$
 (PC)

em que $C^1 \ni f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $C \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto fechado e convexo. É possível reescrever (PC) como um problema de minimização irrestrita na forma (P) como

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

em que

$$\delta_C(\mathbf{x}) \coloneqq \begin{cases} 0, & \mathbf{x} \in C, \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}$$
(2.54)

O método do gradiente projetado para resolver (PC) consiste na iteração

$$\mathbf{x}^{k+1} = \operatorname{proj}_C(\mathbf{x}^k - \gamma_k \nabla f(\mathbf{x}^k)), \qquad (2.55)$$

que envolve o operador de projeção ortogonal

$$\operatorname{proj}_{C}(\mathbf{x}) \coloneqq \underset{\mathbf{u} \in C}{\operatorname{arg\,min}} \|\mathbf{x} - \mathbf{u}\|.$$

Note que (2.55) está bem definido e é único devido às hipóteses impostas sobre o conjunto C, e esse método só é empregado quando a projeção em C é de fácil cálculo.

O método do gradiente espectral projetado, ou Spectral Projected Gradient method (SPG) (BIRGIN; MARTÍNEZ; RAYDAN, 2000), nasceu do esquema (2.55) com a escolha $\gamma_k = \gamma_k^{BBR}$, já consolidada no caso irrestrito àquela altura. O artigo (BIRGIN; MARTÍNEZ; RAYDAN, 2014) e suas citações ali fornecem alguns exemplos de aplicações desse método. Algumas das generalizações desse método podem ser obtidas em (BIRGIN; MARTÍNEZ; RAYDAN, 2003) e (DAI; FLETCHER, 2005a). Desde então, outras estratégias de busca linear não monótonas foram testadas para esse método, além de diversos passos espectrais alternativos.

Uma correlação curiosa é que $\operatorname{proj}_C = \operatorname{prox}_{\delta_C}$, reduzindo o esquema (2.55) a um caso específico do esquema proximal clássico (1.4) com $h = \delta_C$. Outro detalhe é que para $\gamma_k = \gamma_k^{BBR}$ e $\mathbf{y}^k = \mathbf{w}^k = \mathbf{x}^k$, (1.4), (2.50) e (2.51) juntos implicam

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &\in \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u}\in \mathrm{dom}\,h} \left\{ h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k^{BBR}} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\} \\ &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u}\in \mathrm{dom}\,h} \left\{ \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{\mu_k}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}^k)^T \mathbf{I}(\mathbf{u} - \mathbf{x}^k) + h(\mathbf{u}) \right\} \\ &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u}\in \mathrm{dom}\,h} \left\{ \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}^k)^T \mathbf{H}_k (\mathbf{u} - \mathbf{x}^k) + h(\mathbf{u}) \right\} \\ &= \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{u}\in \mathrm{dom}\,h} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{x}^k)^T \mathbf{H}_k (\mathbf{u} - \mathbf{x}^k) + h(\mathbf{u}) \right\}, \end{aligned}$$

ou seja, o esquema proximal com o passo espectral consiste em minimizar uma aproximação de segunda ordem de $f \text{ em } \mathbf{x}^k$ (termos à esquerda na última equação) e h original, o que é essencialmente uma aproximação da função objetivo F completa. Essa última observação, apesar de não garantir boas propriedades de métodos proximais espectrais por si só, ao menos os torna conceitualmente razoáveis e justifica uma maior investigação teórica e numérica.

2.3.3 Alternativas de tamanho passo

A literatura em alternativas para o passo espectral é extensa e segue em diferentes direções para explorar as propriedades espectrais do método original. O trabalho (FRIEDLANDER et al., 1999) expandiu os resultados de (RAYDAN, 1993) e demonstrou que a análise de convergência para quadráticas é ainda válida para retardos maiores em relação ao método de Cauchy. Em (DAI et al., 2005) é apresentado o *Cyclic Barzilai-Borwein-Raydan method* (CBBR), que reutiliza o mesmo tamanho de passo espectral por um número fixo de iterações consecutivas antes de recalculá-lo. Esse reuso tem como intuito gerar direções de busca que melhor aproximam autovetores da Hessiana. Para otimização irrestrita genérica, em (LUENGO; RAYDAN, 2003) foi introduzido outro método com retardos, agora dinâmicos, que se baseia na proximidade do gradiente com um autovetor para decidir se uma atualização de passo é necessária. Já (BURDAKOV; DAI; HUANG, 2019) empregou outra estratégia para garantir convergência que não envolve valores de função, testando versões tanto com γ_k^{BBR} quanto γ_k^{BBR2} .

Já em (DAI; YUAN; YUAN, 2002; DAI; YUAN, 2005) são abordadas duas estratégias com ideias espectrais que tentam quebrar o comportamento de zigue-zague gerado pelo uso repetido de γ_k^{SD} , ambas envolvendo o uso de passos menores periodicamente. Nesses artigos são apresentados, respectivamente, o tamanho de passo de Yuan e o subsequente método de Dai-Yuan (DY), que se mostrou bastante competitivo com relação ao método BBR clássico e inspirou múltiplas variações. Dentre elas, destaca-se pelos seus desempenhos em testes comparativos o método SDC (ASMUNDIS et al., 2014), baseado no DY com uma leve modificação que reutiliza um mesmo passo de Yuan em múltiplas iterações consecutivas.

O uso alternado dos passos apresentados ou outras variações do passo espectral foi estudado em (GRIPPO; SCIANDRONE, 2002; DAI; YUAN; YUAN, 2002), o primeiro baseado em qual dos passos respeita condições de caixa moderadas e o segundo em um critério que determina quanto a função aproxima uma quadrática localmente. Esse último trabalho utiliza ideias de interpolação para derivar um novo candidato a tamanho de passo. Posteriormente (FRASSOLDATI; ZANNI; ZANGHIRATI, 2007) testou uma alternativa que varia dinamicamente entre γ_k^{BBR2} ou γ_k^{SD} e γ_k^{BBR} . O intuito dessas alternâncias é tomar passos menores que diminuam as maiores componentes dos gradientes dos iterados antes de tomar um passo γ_k^{BBR} próximo de $\frac{1}{\lambda_1}$ (inverso do maior autovalor da Hessiana) e obter assim uma minimização significativa. Um dos métodos resultantes, ABBmin2, se mostrou outra alternativa competitiva aos já mencionados DY e SDC.

Por sua vez, (HUANG et al., 2019b) elaborou sobre o Asymptotic Optimal Gradient method (AOPT) de (DAI; YANG, 2006). As modificações efetuadas nesse primeiro artigo eliminaram o emprego indesejado de ocasionais passos γ_k^{SD} (2.47) ou outros passos artificialmente pequenos para ajustar o gradiente antes de um passo maior. Em (HUANG et al., 2019a) é estabelecido o comportamento assintótico de uma família de métodos que incluem o método de Cauchy e o AOPT. Além disso, é estabelecido um método derivado da imposição de término finito para problemas quadráticos estritamente convexos, e uma versão híbrida que executa um número fixo de iterações BBR antes de inicializar essa nova estratégia finita. Tanto o tamanho de passo primal γ_k^{BBR} quanto o dual γ_k^{BBR2} são testados nessa variante híbrida, com resultados promissores.

Agora para o método SPG, o passo dual γ_k^{BBR2} foi estudado em (DAI; FLET-CHER, 2005b) no contexto de otimização com restrições de caixa. Um método que alterna entre o passo primal e dual mostrou-se efetivo em se manter na face da solução ótima após identificá-la pela primeira vez. Essa estratégia difere significativamente de outras populares para o problema, visto que ela não emprega uma mudança para um método irrestrito na face ótima. Essa abordagem possui potenciais benefícios em problemas com regularização com a norma ℓ_0 , nos quais se busca o conjunto ótimo de componentes não nulas da solução, analogamente ao conjunto de restrições ativas ótimo nesses problemas.

2.3.4 Atualizações quasi-Newton de dimensão maior

Uma grande barreira ainda é encontrada, entretanto, em uma das progressões metodológicas de maior potencial: a incorporação de mais informações de segunda ordem no modelo do passo proximal quasi-Newton, para além do (relativamente) limitado conceito de aproximações múltiplas da identidade μ I. Os artigos (LECONTE; ORBAN, 2024) e (THEMELIS; STELLA; PATRINOS, 2018) abordaram essa possibilidade sob perspectivas bem distintas.

O primeiro, (LECONTE; ORBAN, 2024), se pautou nos desenvolvimentos de (ARAVKIN; BARALDI; ORBAN, 2022), que fornece uma base algorítmica com passos limitados por uma região de confiança e flexibilidade na escolha do *solver* do subproblema iterativo. Além de possivelmente usar passos como em (2.2) para atualizar regiões de confiança, o método também incorporava o chamado passo proximal indefinido,

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{s}\in\mathbb{R}^n} \left\{ h(\mathbf{x}^k + \mathbf{s}) + \langle \nabla f(\mathbf{w}^k), \mathbf{s} \rangle + \frac{1}{2} \mathbf{s}^T \mathbf{D}^k \mathbf{s} + \delta_{[\tilde{\mathbf{l}}^k, \tilde{\mathbf{u}}^k]}(\mathbf{s}) \right\},$$
(2.56)

em que $\mathbf{D}^k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é diagonal e aproxima a Hessiana de f localmente, δ é a função indicadora (2.54), e $[\tilde{\mathbf{l}}^k, \tilde{\mathbf{u}}^k]$ a interseção de um conjunto viável inicial de (P), gerado por restrições de caixa, com uma região de confiança de norma ℓ_{∞} definida pelo método na iteração k. A implementação de uma região de confiança torna todo problema (2.56) minimizável independente dos valores de \mathbf{D}^k e da prox-limitação de h. Isso permite termos quadráticos não positivos em \mathbf{D}^k e, portanto, a captura da não convexidade local da curvatura. Em particular, a escolha da norma infinito para a região de confiança também possibilita incorporar naturalmente restrições de caixa no problema original, sem alterar muito as demonstrações do artigo.

Sob a hipótese de h separável, o problema de calcular o k-ésimo passo ótimo \mathbf{s}^k em (2.56) pode ser resolvido componente a componente por

$$\mathbf{s}_{i}^{k} \in \operatorname*{arg\,min}_{s \in \mathbb{R}} \omega_{i}^{k}(s) + \delta_{[\tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}]}(s), \qquad (2.57)$$



Figura 1 – Casos com \mathbf{s}_i^k multivariado para $h = \lambda \| \cdot \|_0$. Em azul (preenchido) está $\omega_i^k(s)$, cujos valores ótimos em $[\tilde{\mathbf{l}}_i^k, \tilde{\mathbf{u}}_i^k]$ estão conectados em preto (tracejado).

em que

$$\omega_i^k(s) \coloneqq h_i(\mathbf{x}_i^k + s) + \nabla_i f(\mathbf{x}^k)s + \frac{1}{2}\mathbf{d}_i^k s^2,$$

 $\nabla_i f(\mathbf{x}^k)$ é a *i*-ésima componente do gradiente e $\mathbf{d}^k := \operatorname{diag}(\mathbf{D}^k)$.

Exemplo 1. Seja $h(\mathbf{x}) = \lambda \|\mathbf{x}\|_0$ em que $\|\mathbf{x}\|_0 = |\{i \mid \mathbf{x}_i \neq 0\}|$ é a chamada norma l_0 que indica o número de elementos não nulos de um vetor. Portanto

$$\omega_i^k(s) = \lambda |\mathbf{x}_i^k + s|_0 + \nabla_i f(\mathbf{x}^k)s + \frac{1}{2}\mathbf{d}_i^k s^2 = \begin{cases} \nabla_i f(\mathbf{x}^k)s + \mathbf{d}_i^k s^2, & s = -\mathbf{x}_i^k \\ \lambda + \nabla_i f(\mathbf{x}^k)s + \frac{1}{2}\mathbf{d}_i^k s^2, & s \neq -\mathbf{x}_i^k \end{cases}$$

Quando $\mathbf{d}_{i}^{k} \neq 0$, seja $s_{i}^{*} \coloneqq -\frac{\nabla_{i} f(\mathbf{x}^{k})}{\mathbf{d}_{i}^{k}}$ (ponto crítico da parábola definida por $\nabla_{i} f(\mathbf{x}^{k})s + \mathbf{d}_{i}^{k}s^{2}$). Então, caso $\mathbf{d}_{i}^{k} > 0$ (Subfigura 1(c)), o esquema (2.57) gera uma componente

$$\mathbf{s}_{i}^{k} \in \begin{cases} \operatorname{proj}_{[\tilde{\mathbf{l}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}]}(s_{i}^{*}), & -\mathbf{x}_{i}^{k} \notin [\tilde{\mathbf{l}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}] \\ \underset{s \in \{-\mathbf{x}_{i}^{k}\} \cup \operatorname{proj}_{[\tilde{\mathbf{l}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}]}(s_{i}^{*})}{\operatorname{proj}_{[\tilde{\mathbf{l}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}]}(s_{i}^{*})} \omega_{i}^{k}(s), & -\mathbf{x}_{i}^{k} \in [\tilde{\mathbf{l}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}] \end{cases}, \end{cases}$$

ou seja, os candidatos para \mathbf{s}_i^k são o mínimo da parábola projetado no conjunto factível (caixa $[\tilde{\mathbf{l}}^k, \tilde{\mathbf{u}}^k]$) $e - \mathbf{x}_i^k$, quando esse último se encontra nesse conjunto.

Caso $\mathbf{d}_i^k \leq 0$, por sua vez, é obtido

$$\mathbf{s}_{i}^{k} \in \begin{cases} S \coloneqq \operatorname*{arg\,min}_{s \in [\tilde{\mathbf{I}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}]} & -|\mathbf{x}_{i}^{k} + s|_{0}, & -\mathbf{x}_{i}^{k} \notin [\tilde{\mathbf{I}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}] \\ \\ \operatorname*{arg\,min}_{s \in \{-\mathbf{x}_{i}\} \cup S} & \omega_{i}^{k}(s), & -\mathbf{x}_{i}^{k} \in [\tilde{\mathbf{I}}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}^{k}] \end{cases}$$

em que S é o conjunto minimizador no intervalo desconsiderando a regularização h, que pode ser ainda dividido em mais dois casos. Se $\mathbf{d}_i^k = 0$ (Subfigura 1(a)),

$$S = \underset{s \in [\tilde{\mathbf{I}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}]}{\operatorname{arg\,min}} \omega_{i}^{k}(s) - |\mathbf{x}_{i}^{k} + s|_{0} = \begin{cases} \{\tilde{\mathbf{I}}_{i}^{k}\}, & \nabla_{i}f(\mathbf{x}^{k}) > 0\\ \{\tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}\}, & \nabla_{i}f(\mathbf{x}^{k}) < 0\\ [\tilde{\mathbf{I}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}], & \nabla_{i}f(\mathbf{x}^{k}) = 0 \end{cases}$$

logo basta comparar $-\mathbf{x}_{i}^{k}$ (caso esteja em $[\tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}]$) com um valor extremal do intervalo que depende do sinal da i-ésima componente do gradiente.

Já se $\mathbf{d}_i^k < 0$ (Subfigura 1(b)),

$$S = \underset{s \in [\tilde{l}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}]}{\arg\min \omega_{i}^{k}(s) - |\mathbf{x}_{i}^{k} + s|_{0}} = \begin{cases} \{\tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}\}, & |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}| > |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}| \\ \{\tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}\}, & |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}| < |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}| , \\ \{\tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}, \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}\}, & |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{l}}_{i}^{k}| = |s_{i}^{*} - \tilde{\mathbf{u}}_{i}^{k}| \end{cases}$$

isso é, S consiste do(s) ponto(s) do intervalo mais distante(s) do máximo da parábola $\nabla_i f(\mathbf{x}^k) s + \mathbf{d}_i^k s^2$.

Uma aproximação \mathbf{D}^k pode ser obtida através da diagonalização de atualizações quasi-Newton cheias, como LSR1 e (L)BFGS, ou empregando atualizações que preservam diagonalidade, como a já mencionada espectral, a PSB e a atualização de Andrei (ANDREI, 2019). Foi provado que ϵ tolerância é alcançada para uma medida de criticalidade apropriada (definida no artigo) em $\mathcal{O}(\epsilon^{-2}) \ \forall \epsilon \in (0, 1)$, tanto para o método *Trust-Region method with Diagonal Hessian approximations* (TRDH), que usa ambos (2.2) e (2.56), quanto para sua variante puramente indefinida, iTRDH. Esses resultados foram possíveis com hipóteses controláveis sobre $\{\mathbf{D}^k\}$ e moderadas sobre a acurácia do modelo dos subproblemas e o decréscimo relativo do modelo obtido pelos passos ótimos. Outra hipótese essencial ainda é $f \in C_{L_f}^{1,1}$. Até mesmo uma variante não monótona de busca linear foi analisada.

Entretanto, a forma diagonal da aproximação da Hessiana proposta ainda é um fator limitante. Os autores propõem encontrar soluções de (2.56) também para funções não separáveis comuns em modelagens na forma (P). Outra opção é explorar diferentes aproximações diagonais da Hessiana além daquelas já estudadas, incluindo novas atualizações quasi-Cauchy que se baseiam na equação secante fraca (ZHU; NAZARETH; WOLKOWICZ, 1999). Já (THEMELIS; STELLA; PATRINOS, 2018) aborda uma vertente inicialmente proposta em (PATRINOS; BEMPORAD, 2013) que consiste em alternar (2.2) com um passo quasi-Newton aplicado à função de penalização real e exata para (P)

$$F_{\gamma}(\mathbf{x}) = F_{\gamma}^{f,h}(\mathbf{x}) \coloneqq \inf_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) + h(\mathbf{u}) + \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{u} - \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2\gamma} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2 \right\},$$

chamada no inglês de Forward-Backward Envelope (FBE). É imediato constatar a relação íntima dessa função com o esquema proximal (1.4). O estudo do FBE, anteriormente limitado a casos em que $f \in C^2$ e h convexa, foi ampliado para hipóteses mais gerais. Mesmo nesse contexto mais amplo, foi possível garantir (1) diferenciabilidade contínua do FBE em torno de pontos críticos, (2) duas vezes diferenciabilidade (estrita) nesses pontos e (3) equivalência entre mínimos locais fortes da função original e do FBE.

Utilizando as propriedades investigadas do FBE e dos pontos críticos, foi demonstrada a convergência global do método não monótono proposto, ZeroFPR. Essa convergência é superlinear quando se usam direções quasi-Newton de Broyden (entre outras que satisfaçam certas condições). Ambos esses resultados foram possíveis sob requisitos adicionais moderados no ponto limite e a hipótese convencional de $f \in C_{L_f}^{1,1}$.

Resta investigar a eficácia de fórmulas de atualização simétrica como BFGS e L-BFGS quando usadas em conjunto com o ZeroFPR. Embora o Jacobiano do resíduo de ponto fixo no ZeroFPR não seja tipicamente simétrico (condição necessária para a teoria), resultados empíricos do mesmo artigo indicam que essas atualizações têm desempenho competitivo, potencialmente devido às propriedades do Jacobiano em mínimos locais fortes.

Outro possível foco é conectar os aspectos teóricos e práticos desses métodos de segunda ordem em cenários em que a hipótese tradicional de um gradiente globalmente Lipschitz contínuo para a função suave f é relaxada, como foi previamente feito para os métodos tratados nesse trabalho. Um aspecto fundamental nessa direção envolve analisar a eficácia de diferentes estratégias de busca linear, incluindo abordagens não monótonas como a condição de Grippo-Lampariello-Lucidi (GLL) (GRIPPO; LAMPARIELLO; LUCIDI, 1986), para garantir a convergência dos métodos como o ZeroFPR, TRDH e iTRDH.

Por fim, foi averiguado em diversos experimentos que a atualização espectral frequentemente supera atualizações quasi-Newton mais sofisticadas (LECONTE; ORBAN, 2024), o que justifica uma análise mais aprofundada dessa primeira para compreender as razões subjacentes para sua eficácia. Nesse tema, seria pertinente também testar alguns dos demais tamanhos de passo apresentados na Subseção 2.3.3.

3 Otimização com esparsidade induzida pela norma zero

O campo da esparsidade de grupos engloba problemas cuja variável de decisão possui componentes (índices) agrupados de forma disjunta e deseja-se limitar ou penalizar o número de grupos não nulos. Essa classe de problemas é interessante devido à sua aplicabilidade em diversos contextos práticos, como na decisão de carteiras de investimento, processamento de imagens e sinais, remoção de ruído de variação total, amostragem esparsa (do inglês *Compressed Sensing*, CS) e aproximação de posto baixo, entre outros. Veja (BECK; HALLAK, 2018a) e citações ali presentes para mais exemplos de aplicações.

A organização em grupos surge em contextos em que existe alta correlação entre certas variáveis explanatórias e se faz necessário, portanto, categorizar essas variáveis em grupos distintos. Essa categorização pode também ser consequência intrínseca das propriedades do modelo escolhido, sendo as variáveis agrupadas por uma regra previamente estabelecida (como no Exemplo 2).

Com o desenvolvimento de uma teoria de estacionaridade e de um operador proximal para funções de regularização h envolvendo a norma ℓ_0 em uma série de artigos recentes (BECK; HALLAK, 2016; BECK; ELDAR, 2012; BECK; HALLAK, 2018a; BECK; HALLAK, 2018b), abriram-se novas possibilidades para a modelagem de esparsidade de grupos. Em (BECK; ELDAR, 2012) há a introdução de um conceito fundamental que permeia esses artigos: a hierarquia entre condições de otimalidade baseadas em estacionariedade e coordenadas. Também são elaborados dois métodos para a obtenção de pontos satisfazendo essas condições, cujos princípios de funcionamento formam uma base para métodos posteriores. Esses métodos são o *Iterative Hard Thresholding method* (IHT), popular no contexto de CS e de origens no modelo de esparsidade convencional induzida pela norma ℓ_1 , e o *Greedy Sparse-Simplex method* (GSS).

Por fim, o trabalho (BECK; HALLAK, 2018a) expande o escopo do problema ao abandonar algumas hipóteses e foca nos tópicos de cálculo do mapeamento proximal e condições de otimalidade para um problema mais geral. Nesse artigo, a teoria do método IHT é adaptada para lidar com a descontinuidade da função *h* e a estrutura de blocos, sendo necessários certos cuidados teóricos para garantir convergência. A condição de *Coordinate-Wise Optimality* (CWO) e o respectivo algoritmo GSS são adaptados, gerando a condição mais relaxada *Partial Coordinate-Wise Optimality* (PCWO) e o algoritmo *Partial Group Coordinate Descent* (PGCD). Esses conceitos e algoritmos não mais exigem a imposição de simetria no problema presente previamente em (BECK; HALLAK, 2016) e fornecem uma teoria mais unificada e robusta do que aquela dos artigos predecessores. O operador proximal genérico apresentado em (BECK; HALLAK, 2018a) pode ser expandido levemente para uma classe mais ampla de funções h com a introdução de um limitante inferior para o número de grupos não nulos. Esse limitante fornece um controle na esparsidade máxima da solução, possivelmente beneficiando contextos nos quais certa diversificação nas componentes é desejável. Um exemplo é o problema de carteira de investimentos, no qual eventualmente é prudente não investir todo o capital em algumas poucas opções. O intuito dessa diversificação é evitar grande variância nos retornos e obter, assim, investimentos mais seguros.

3.1 Definições e exemplos

Para estabelecer a notação de grupo, primeiro define-se uma partição predeterminada de índices, $\{1, 2, ..., n\}$, como $\{G_i\}_{i=1}^m$, formada por *m* grupos de respectivos tamanhos $n_1, n_2, ..., n_m$. Sem perda de generalidade via reindexação, esses grupos podem ser da forma

$$G_1 \coloneqq \{1, 2, \dots, n_1\}, G_2 \coloneqq \{n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 + n_2\}, \dots,$$
$$G_m \coloneqq \{n_{m-1} + 1, n_{m-1} + 2, \dots, n\}.$$

Dado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e um conjunto de índices $T \subset \{1, \ldots, n\}$, será denotado \mathbf{x}_T o subvetor composto das componentes de \mathbf{x} correspondente aos elementos de T. O mapeamento $g : \mathbb{R}^n \to \{0, 1\}^m$, que indica quais grupos possuem componentes não nulos, é definido como

$$g(\mathbf{x})_i := \begin{cases} 1, & \mathbf{x}_{G_i} \neq \mathbf{0}, \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Logo $g(\mathbf{x})_i = 1$ indica que o grupo G_i está *ativo* para o vetor \mathbf{x}^n . Caso contrário, ele é denominado *inativo*. Já $C_{l,s}$ é o conjunto de todos os vetores com no mínimo l e no máximo s grupos ativos, sendo $l, s \in \mathbb{N}_0$ e $l \leq s \leq m$, isso é,

$$C_{l,s} := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : l \leq \|g(\mathbf{x})\|_0 \leq s \}$$

Vale notar que o problema convencional de esparsidade corresponde intuitivamente ao caso no qual cada grupo é unitário, e assim $C_{l,s}$ corresponde ao conjunto de todos os vetores *s*-esparsos com no mínimo *l* componentes não nulas.

Finalmente, o problema estudado é

min
$$f(\mathbf{x}) + \lambda \|g(\mathbf{x})\|_0$$

s. a $\mathbf{x} \in C_{l,s} \cap B$, (P0)

sendo $\lambda \ge 0$ um parâmetro de penalidade. Por sua vez, $C^1 \ni f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é uma função continuamente diferenciável limitada inferiormente e $B \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto definido por

$$B \coloneqq \prod_{i=1}^{m} \left(D_i \cup \{\mathbf{0}\} \right) = \left(D_1 \cup \{\mathbf{0}\} \right) \times \left(D_2 \cup \{\mathbf{0}\} \right) \times \cdots \times \left(D_m \cup \{\mathbf{0}\} \right), \qquad (3.1)$$

sendo

em que, $\forall i, D_i \subset \mathbb{R}^{n_i}$ é um conjunto fechado não vazio. O problema também pode ser reescrito na forma irrestrita (P) como

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x}),$$
$$h(\mathbf{x}) \coloneqq \lambda \|g(\mathbf{x})\|_0 + \delta_{B \cap C_{l,s}}(\mathbf{x}). \tag{3.2}$$

Nessa formulação, o problema possui uma aparência bastante familiar no contexto de análise proximal discutido no Capítulo 1. De fato, o operador proximal (1.3) de $h(\mathbf{x})$ é bastante estudado em (BECK; HALLAK, 2018a) para o caso l = 0, e até mesmo um algoritmo é elaborado para calcular um desses elementos. No Teorema 3 é apresentada uma caracterização do operador proximal de (3.2) para o caso geral $l \leq s$, abrindo assim espaço para novas modelagens compósitas.

Exemplo 2 (minimização com limitação de esparsidade de grupo). Tratado em (BECK; HALLAK, 2018a), o problema de otimização de portfólio consiste na minimização da covariância ponderada menos o retorno esperado (que será de fato $C_{L_f}^{1,1}$) sujeita às limitações no número de setores. Isso resulta no problema na forma (P0)

$$\min_{\mathbf{x} \in C_{l,s} \cap \Delta_n} \gamma \cdot \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{x}$$

$$\mathbf{x} \in C_{l,s} \cap \Delta_n$$

$$(3.3)$$

Esse modelo supõe o conhecimento de alguns parâmetros, dentre eles $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$ (vetor de retorno médio), $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (matriz de covariância semidefinida positiva) e $\gamma > 0$ (constante de penalização da variância com respeito ao retorno médio). A otimização se dá sobre o simplex unitário,

$$\Delta_n = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \ge \mathbf{0}, \ \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i = 1 \right\},\$$

que representa as limitações financeiras. As variáveis de decisão já são separadas em grupos disjuntos baseados em seus setores de origem e, em alguns casos, é desejado limitar o número de setores que receberão investimentos e, ao mesmo tempo, garantir uma variedade mínima.

Exemplo 3 (minimização com limitação e penalização de esparsidade convencional). *Considere o problema*

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1$$
(3.4)

onde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Nesse caso $f \in C_{L_f}^{1,1}$ com $L_f = \lambda_{max}(\mathbf{A}^H \mathbf{A})$. Esse modelo recebe o nome de Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO) (TIBSHIRANI, 1996), nomenclatura originária da comunidade estatística. Para a escolha de regularização ℓ_0 , também pode ser inserida a limitação de esparsidade convencional para obter maior controle, resultando no problema no modelo (P)

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_0 + \delta_{C_{l,s}}(\mathbf{x}).$$
(3.5)

Ambos esses modelos muitas vezes recebe o nome de problema inverso ou de regressão, uma vez que se busca recuperar um \mathbf{x} (muitas vezes chamado de sinal) que explicaria melhor um conjunto de medições \mathbf{b} provenientes de um fenômeno observável, relacionados por uma transformação representada pela matriz \mathbf{A} . Com a adição da regularização que induz esparsidade e elimina possíveis ruídos, o problema recebe o nome Basis Pursuit De-Noising (BPDN), ou regressão com seleção de variáveis, comumente usado pela comunidade de processamento de sinais.

Os pesquisadores do LNLS que trabalham no feixe IMBUIA do acelerador de partículas SIRIUS, que oferece espectrografia de materiais usando infravermelho, propuseram utilizar uma modelagem compósita para acelerar seus experimentos. A estratégia atual empregada é obter diversas medições de infravermelho refratadas pela amostra em distâncias regularmente espaçadas da saída do feixe, obtendo assim um interferograma com pontos também espaçados regularmente. A partir desse interferograma, uma transformada rápida de Fourier (FFT, do inglês *Fast Fourier Transform*) é aplicada para obter um espectrograma, cujo detalhamento depende diretamente da quantidade de medidas efetuadas. Essa estratégia, apesar de funcional, é limitada pelo tempo experimental que escala com o tamanho da malha de pontos a ser testada na amostra, tornando-se proibitivamente longo quando essa malha é em três dimensões.

Os pesquisadores tentaram a abordagem FISTA (3.4), obtendo soluções insatisfatórias. A ideia geral é tomar **A** como sendo a matriz inversa discreta de Fourier, **b** o interferograma e buscar **x** (espectrograma) que melhor se ajusta aos dados experimentais, com uma regularização que induz esparsidade uma vez que se espera uma solução esparsa tanto por experiência empírica quanto por teoria pautada na Física.

A Figura 2 mostra três reconstruções da parte real do espectrograma do óleo de silicone obtidas com o método NSPG (que será introduzido no Capítulo 4) com o intuito de comparar os diferentes modelos. O código em Julia está disponível em https://github.com/GBelemBarbosa/Qualificacao, e os testes podem ser reproduzidos ou modificados seguindo as instruções no caderno spectroscopy.jl.

Os parâmetros de penalização λ para cada modelo foram ajustados manualmente para obter a melhor solução possível sem causar degeneração no sinal reconstruído.



Figura 2 – Espectrograma obtido com 20% das amostras não uniformemente espaçadas e $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}.$

A técnica para a escolha desses parâmetros foi obtida da literatura sobre o problema LASSO e consiste em simular o passo gradiente unitário inicial, $\mathbf{x}^0 - \nabla f(\mathbf{x}^0)$,

e calcular um valor máximo nesse ponto baseado na estrutura do operador proximal da regularização escolhida. Por fim, é tomada uma fração desse valor como λ (LOPES; SANTOS; SILVA, 2019). Seja $c \in [0, 1]$ o parâmetro ajustável e $\|\mathbf{x}\|_{\infty} \coloneqq \max_{i=1,2,...,n} |\mathbf{x}_i|$ a norma infinito. Com \mathbf{x}^0 sendo a origem, escolha clássica para problemas esparsos, e pela função f usada, essa abordagem leva à fórmula $\lambda = c \|\mathbf{A}^H \mathbf{b}\|_{\infty}$, levando em conta o chamado soft threshold operator, $\operatorname{prox}_{\lambda\|\cdot\|_1} \coloneqq \mathcal{T}_{\lambda}$. Já para $\operatorname{prox}_{\lambda\|\cdot\|_0+\delta_{C_{l,s}}}$ (definido no Teorema 3 e calculado através do Algoritmo 5), é tomado $\lambda = \frac{c \|\mathbf{A}^H \mathbf{b}\|_{\infty}^2}{2L_f}$.

Quando as amostras do interferograma são substancialmente mais escassas do que a precisão desejada para o espectrograma e não regularmente espaçadas (outro ponto de interesse dos pesquisadores), é possível perceber na Subfigura 2(a) que a solução da abordagem ℓ_1 (3.4) apresenta problemas. Em particular, ela sofre na captura da altura exata dos picos, sempre ficando abaixo das amplitudes reais durante os experimentos. Isso se dá pela fórmula de \mathcal{T}_{λ} , que envolve subtrair λ do valor de cada componente não nula. Ainda assim, a solução claramente tenta descrever os sinais secundários menores, com detalhamento razoável.

Já a solução para a norma ℓ_0 somente como penalização (modelo (3.5) com l = 0 e s = n) na Subfigura 2(b) basicamente ignora as componentes de menor amplitude, mas retorna maior precisão na altura de alguns picos, enquanto outros sofrem do problema oposto ao da norma ℓ_1 , ficando levemente acima das amplitudes reais. A razão para esse fenômeno é provavelmente que o descarte das amplitudes menores força o método a tentar compensar através da magnitude das componentes dominantes que restam, o que pode resultar tanto em um melhor ajuste dessas últimas quanto no surgimento de discrepâncias que tentam simular a falta da informação descartada. A qualidade da captura das alturas é aleatória ou, no mínimo, pouco controlável por parte do usuário. Vale ressaltar que essa precisão nos picos é essencial para a análise da composição da amostra e o principal motivo pelo qual a norma ℓ_1 havia sido descartada pelos pesquisadores do IMBUIA.

O modelo usado na obtenção da Subfigura 2(c) demonstra as melhores características dos dois anteriores, obtendo a melhor solução no geral. O valor l = 1300 foi obtido tendo-se conhecimento prévio da esparsidade do espectro real, indisponível em um cenário realista. Contudo, essa estratégia pode ser incorporada no Exemplo 3 caso exista uma estimativa precisa da esparsidade que o espectrograma desejado possui, seja proveniente do histórico das soluções para o modelo em experimentos anteriores, ou com base em conjecturas e dados disponíveis na literatura teórica. Em problemas nos quais é possível tal estimativa de l e/ou s ou esses parâmetros são de escolha livre, como no Exemplo 2, explorar esses parâmetros da regularização (3.2) se mostra uma alternativa atraente. Outros valores de l e seus respectivos efeitos nas soluções podem ser analisados na Figura 9. Esse exemplo simples ilustra as diferenças nas características das soluções devido ao tipo de modelagem. Dependendo da aplicação e do que se deseja obter com precisão, a norma ℓ_0 , principalmente em uníssono ao ajuste de l e s a partir de palpites razoáveis baseados no problema, pode ser preferível à sua contraparte ℓ_1 mais estabelecida.

É possível que a recuperação de sinal acima sequer seja o tipo de problema no qual a modelagem ℓ_0 mais se destaca, uma vez que o espectrograma ainda é uma curva contínua, apesar da discretização empregada. Exemplos com soluções descontínuas com muitas entradas nulas, como sinais binários, possuem algum potencial inexplorado com essa abordagem. Isso se dá porque a norma ℓ_0 pode ser entendida como o extremo da ℓ_1 que induz nulidade com mais ênfase, dada sua natureza descontínua e o fato de medir esparsidade diretamente.

De fato, em muitas aplicações, o uso da norma ℓ_1 pode ser visto como uma relaxação motivada pelo caráter relativamente recente da teoria por trás da norma ℓ_0 . O operador proximal dessa última, por exemplo, não era completamente caracterizado e compreendido para casos genéricos até (BECK; HALLAK, 2018a). Outro motivo pelo qual a ℓ_0 é negligenciada é sua falta de continuidade que restringe a teoria disponível para garantia de convergência dos algoritmos de otimização. Entretanto, caso a eficiência não seja um ponto considerado tão crítico, pode ser vantajosa a troca de tempo de execução e robustez da teoria por soluções qualitativamente superiores em alguns contextos.

3.2 O operador proximal grupo-esparso

Inicialmente, algumas notações e definições adicionais serão introduzidas. Dado um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ e i = 1, 2, ..., m, $\mathbf{v}_{[i]}$ denota o *i*-ésimo maior valor em \mathbf{v} . Em particular, $\mathbf{v}_{[1]} \ge \mathbf{v}_{[2]} \ge ... \ge \mathbf{v}_{[m]}$. O conjunto

$$\mathcal{S}_{i}(\mathbf{v}) \coloneqq \{S \cup T \mid S \coloneqq \{j \mid \mathbf{v}_{j} > \mathbf{v}_{[i]}\}, \ T \subset \{j \mid \mathbf{v}_{j} = \mathbf{v}_{[i]}\}, \ |S \cup T| = i\} \quad \forall i = 1, 2, \dots, m$$

$$(3.6)$$

compreende todos os possíveis subconjuntos de exatos *i* índices associados às maiores componentes de **v**. O conjunto $S_i(\mathbf{v})$ não contém necessariamente um único elemento, visto que **v** pode conter valores idênticos. Por exemplo, se $\mathbf{v} = (0 \ 0 \ 1)^T$, então $S_2(\mathbf{v}) =$ $\{\{1,3\},\{2,3\}\},$ em que $S = \{j \mid \mathbf{v}_j > \mathbf{v}_{[2]}\} = \{3\}$ e os subconjuntos de cardinalidade viável de $\{j \mid \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_{[2]}\}$ são $T = \{1\}$ e $T = \{2\}$, respectivamente.

Dado $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n,$ é definido o operador de projeção ortogonal em um conjunto $C \subset \mathbb{R}^n,$

$$P_C(\mathbf{x}) \coloneqq \operatorname{prox}_{\delta_C}(\mathbf{x}) = \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{y}\in C} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2,$$

e a distância ao conjunto D_i ,

$$d_{D_i}\left(\mathbf{x}_{G_i}\right) \coloneqq \min_{\mathbf{z} \in D_i} \left\|\mathbf{x}_{G_i} - \mathbf{z}\right\|_2 \quad \forall i = 1, 2, \dots, m.$$

Note que, $\forall i, d_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i})$ é bem definido por D_i ser fechado. O mapeamento $\omega : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, definido como

$$\omega(\mathbf{x})_i \coloneqq \|\mathbf{x}_{G_i}\|_2^2 - d_{D_i}^2(\mathbf{x}_{G_i}) \quad \forall i = 1, 2, \dots, m,$$
(3.7)

tem um papel importante na determinação dos grupos ativos dos vetores no mapeamento proximal.

Para um conjunto de índices $T \subset \{1, 2, ..., n\}$, a matriz U_T denota a submatriz composta das colunas da matriz identidade I_n correspondentes aos elementos de T, e também são definidos os operadores

$$\mathcal{A}(T) := \bigcup_{i \in T} G_i$$

е

 como

$$\mathcal{B}(T) := \prod_{i \in T} D_i.$$

O suporte de um vetor é o conjunto dos índices de seus grupos ativos, definido

 $I_1(\mathbf{x}) := \{i \in \{1, 2, \dots, m\} \mid g(\mathbf{x})_i = 1\}.$

É definido também o conjunto de índices

$$I_a^{\stackrel{?}{=}}(\mathbf{x}) \coloneqq \left\{ i \in \{1, 2, \dots, m\} \mid \omega(\mathbf{x})_i \stackrel{?}{=} a \right\},\$$

em que $\stackrel{?}{=}$ representa uma relação qualquer, e $a \in \mathbb{R}$ pode também assumir a notação [i] para representar $\omega(\mathbf{x})_{[i]} \quad \forall i = 1, 2, ..., m$.

Relembramos um importante resultado de (BECK; HALLAK, 2018a).

Lema 9. Seja $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \ e \ T, S \subset \{1, 2, \dots, m\}$. Então, $\forall \mathbf{z}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \ satisfazendo$

$$\mathbf{z}_{G_i} \in \begin{cases} P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i}), & i \in T \\ \{\mathbf{0}\}, & i \notin T \end{cases}, \quad \mathbf{y}_{G_i} \in \begin{cases} P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i}), & i \in S \\ \{\mathbf{0}\}, & i \notin S \end{cases}$$

vale que

$$\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|_2^2 - \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i \in S} \omega(\mathbf{x})_i - \sum_{i \in T} \omega(\mathbf{x})_i$$

Demonstração. Veja (BECK; HALLAK, 2018a, Lema 3.1).

Aqui finalmente é apresentada uma caracterização do $\operatorname{prox}_h \operatorname{com} l$ variável cuja argumentação se baseia amplamente em (BECK; HALLAK, 2018a, Teorema 3.2). De fato, não só as mesmas estratégias presentes nesse último teorema são aqui empregadas, como a primeira metade da demonstração, referente ao caso no qual $\omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda$, é conceitualmente idêntica à demonstração para o caso com l = 0 do artigo, a menos de alguns detalhes.

Teorema 3. Seja $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Então $\mathbf{u} \in \text{prox}_h(\mathbf{x})$ se e somente se as condições a seguir são verdadeiras:

(a) $\mathbf{u}_{G_i} \in P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i}) \quad \forall i \in I_1(\mathbf{u});$

(b) Caso $\omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda$ ou $l = 0, \exists T \in \mathcal{S}_s(\omega(\mathbf{x}))$ tal que

$$T \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x}) \subset I_1(\mathbf{u}) \subset T \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x}), \tag{3.8}$$

$$e \ caso \ \omega(\mathbf{x})_{[l]} \leq 2\lambda \ e \ l \geq 1, \ \exists T \in \mathcal{S}_{l-1}(\omega(\mathbf{x})), \ i \in I^{=}_{[l]}(\mathbf{x}) \setminus T \ e$$
$$U \in \begin{cases} \{W \subset I^{=}_{2\lambda}(x) \setminus (T \cup \{i\}) \mid |W| = \min\{|I^{=}_{2\lambda}(\mathbf{x})|, s-l\}\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} = 2\lambda \\ \{\emptyset\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} < 2\lambda \end{cases}$$

tais que

$$T \cup \{i\} \subset I_1(\mathbf{u}) \subset T \cup \{i\} \cup U.$$

$$(3.9)$$

Demonstração. Suponha que **u** satisfaça (a) e (b), e seja $\mathbf{y} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$. Será demonstrado que $\mathbf{u} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$ e que \mathbf{y} satisfaz (a) e (3.8) ou (3.9) (como apropriado) para algum \tilde{T} e, se necessário, \tilde{U} , definidos como em (b). Note que, por (a), $\mathbf{u} \in B$, e por (b), $\mathbf{u} \in C_{l,s}$ (isso será demonstrado em mais detalhes para cada caso). Portanto, como $\mathbf{y} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$ (logo também $\mathbf{y} \in B \cap C_{l,s}$),

$$2\lambda \left(\|g(\mathbf{u})\|_{0} - \|g(\mathbf{y})\|_{0} \right) + \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|_{2}^{2} - \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_{2}^{2} \ge 0.$$
(3.10)

Obviamente, $\mathbf{y}_{G_i} \in P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i}) \ \forall i \in I_1(\mathbf{y})$ (caso contrário, uma solução melhor para o problema que define $\operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$ poderia ser obtida para os mesmos grupos ativos) e, por hipótese, $\mathbf{u}_i \in P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i}) \ \forall i \in I_1(\mathbf{u})$. Portanto, pelo Lema 9, (3.10) é o mesmo que

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) - \sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) \ge 0,$$

que por sua vez equivale a

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda) + \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda) - \sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} (\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda) \ge 0.$$
(3.11)

A princípio, trataremos o primeiro caso de (b). O caso l = 0 é tratado em (BECK; HALLAK, 2018a, Teorema 3.2). Já se $l \ge 1$, de (3.8), de fato $l \le |I_1(\mathbf{u})| \le s$, uma vez que $|T \cap I_{2\lambda}^{>}| \ge l$, visto que $\omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda$, e |T| = s de (3.6).

De (3.8) segue que

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in T \cap I_{2\lambda}^>(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right).$$

Uma vez que T contém índices de um conjunto dos s maiores elementos de $\omega(\mathbf{x})$ e como y tem no máximo s grupos ativos (pois $\mathbf{y} \in C_{l,s}$), é obtido que

$$\sum_{\epsilon T \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda \right) \geq \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda \right).$$

Combinando as duas últimas relações, obtém-se

i

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) \ge \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^>(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right).$$
(3.12)

Utilizando a desigualdade direta

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) \leq 0$$
(3.13)

juntamente com (3.12) resulta em

$$0 \geq \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) - \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$
$$\geq \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$
$$- \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$
$$(3.14)$$
$$\stackrel{(3.11)}{\geq} 0.$$

Assim, a cadeia de desigualdades em (3.14) é satisfeita como uma cadeia de igualdades, e por sua vez (3.10) também é satisfeita como uma igualdade, o que implica que $\mathbf{u} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$ pela definição do operador proximal (1.3). O fato de (3.14) ser uma cadeia de igualdades também implica que

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right)$$

е

$$\sum_{\in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = 0$$

que é equivalente à $I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} = \emptyset$ pela negatividade dos termos do somatório. As duas últimas relações, por sua vez, implicam

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right)$$

Assim, pela validade de (b) para **u** e pelo fato de que $\mathbf{y} \in C_{l,s}$, \mathbf{y} também deve satisfazer (b) (com **u** substituído por \mathbf{y}). Finalmente, como já foi observado, $\mathbf{y}_{G_i} \in P_{D_i}(\mathbf{x}_{G_i})$ $\forall i \in I_1(\mathbf{y})$, mostrando que (a) também vale para \mathbf{y} .

Agora será tratado o segundo caso de (b), no qual $\omega(\mathbf{x})_{[l]} \leq 2\lambda$. De fato, de (3.9), $l \leq |I_1(\mathbf{u})| \leq s$, uma vez que $|T \cup \{i\}| = l$ de (3.6), e $|T \cup \{i\} \cup U| \leq s$ visto que $|U| \leq s - l$ por construção de U. Se $\omega(\mathbf{x})_{[l]} = 2\lambda$, repare que a definição de \mathbf{u} é análoga ao primeiro caso de (b), exceto pela restrição de ter ao menos l grupos ativos. Dessa forma, a mesma demonstração acima pode ser usada, argumentando ao final que \mathbf{y} também deve obedecer a essa restrição máxima de esparsidade.

Já para $\omega(\mathbf{x})_{[l]} < 2\lambda$, de (b) (3.9) e como $U \subset I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})$,

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geqslant}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) + \sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geqslant}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right).$$
(3.15)

De (b) novamente, como T contém índices de um conjunto dos l-1 maiores elementos de $\omega(\mathbf{x}), I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x}) \subset I_1(\mathbf{u})$, e então

$$|I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})| = |I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})| \ge |I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})|.$$
(3.16)

Pela mesma lógica, também tem-se que $I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x}) \subset I_1(\mathbf{u})$ e, portanto,

$$|I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})| = |I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})| \ge |I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})|.$$
(3.17)

Em particular, de (3.16) e pela positividade dos termos do somatório,

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) \ge \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right).$$
(3.18)

Como por construção nesse caso $|I_1(\mathbf{u})| = l \ (U = \emptyset \text{ em } (3.9)) \in |I_1(\mathbf{y})| \ge l$ $(\mathbf{y} \in C_{l,s})$, então

$$\begin{aligned} |I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})| + |I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq}(\mathbf{x})| \stackrel{(3.16)}{\geq} |I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})| + |I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq}(\mathbf{x})| \\ &= |I_{1}(\mathbf{y})| \\ &\geq |I_{1}(\mathbf{u})| \\ &= |I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}(\mathbf{x})| + |I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[l]}^{\geq}|, \end{aligned}$$

ou equivalentemente,

$$|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leqslant}(\mathbf{x})| \ge |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\leqslant} \cap I_{[l]}^{\leqslant}|.$$
(3.19)

A desigualdade acima somada com (3.24) implica em específico que

$$|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})| \ge |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\ge}|, \qquad (3.20)$$

isso é, $I_1(\mathbf{y})$ potencialmente precisa incluir índices de $I_{[l]}^{\leq}$, uma vez que $I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{>} = I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{>}$ por construção $(\mathcal{S}_{l-1}(\omega(\mathbf{x})) \ni T \cup \subset I_1(\mathbf{u}))$. Dessa forma é obtido que

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[l]}^{\geq}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) \stackrel{(3.20)}{\geq} \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right), \tag{3.21}$$

onde também foi usado que $\omega(\mathbf{x})_i \ge \omega(\mathbf{x})_j \ \forall i \in I_{[l]}^{\ge}(\mathbf{x}), \ j \in I_{[l]}^{\le}(\mathbf{x}).$

É possível agora formar a cadeia de desigualdades

$$0 \stackrel{(3.18)}{\geq} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) - \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$= \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) - \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$\stackrel{(3.21)}{\geq} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$- \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) - \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[I]}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$\stackrel{(3.22)}{=} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq}(\mathbf{x})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$- \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) \stackrel{(3.11)}{\geq} 0.$$

Logo, a cadeia acima é satisfeita na igualdade, o que implica, para o segundo termo em particular,

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right), \tag{3.23}$$

e, consequentemente, como $I^{>}_{2\lambda}(\mathbf{x}) \subset I_1(\mathbf{u}),$

$$I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{>} = I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{>}.$$

$$(3.24)$$

Para o último termo de (3.22), (3.23) também fornece (omitindo os termos nulos do somatório em $I_{2\lambda}^{=}$)

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geq}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right).$$
(3.25)

Uma vez que $I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{>} = I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{>}$, o caso $|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})| > |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geq}|$ implicaria em $|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{[l]}^{\leq}(\mathbf{x})| > |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{[l]}^{=}(\mathbf{x})|$, ou seja, \mathbf{y} precisaria de elementos menores que \mathbf{u} no somatório para obter $|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})| > |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geq}|$. Dessa maneira, (3.21) seria satisfeita em desigualdade estrita. Por contradição com a igualdade (3.25), segue que $|I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<}(\mathbf{x})| = |I_1(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geq}|$. Novamente de (3.25), isso implica em

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{[l]}^{<}(\mathbf{x})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = 0$$

Além disso, a relação acima e a negatividade dos termos do somatório em $I_1(\mathbf{y}) \cap I_{[l]}^{<}(\mathbf{x})$ garantem

$$I_1(\mathbf{y}) \cap I_{[l]}^<(\mathbf{x}) = \emptyset. \tag{3.26}$$

Considerando a relação acima, $(3.24) \in |I_1(\mathbf{y})| \ge l$, resta que

$$|I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})| = |I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})| = |I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x})|$$

$$\iff I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x}) = I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x}) = I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x}),$$
(3.27)

relembrando que $I_{2\lambda}^{=}(\mathbf{x}) \subset I_1(\mathbf{u}).$

Usando (3.24), (3.26) e (3.27), o somatório em $I_1(\mathbf{y})$ pode ser reduzido à

$$\sum_{i \in I_1(\mathbf{y})} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) = \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right) + \sum_{i \in I_1(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{<} \cap I_{[l]}^{\geq}} \left(\omega(\mathbf{x})_i - 2\lambda \right),$$

o que por fim resulta na cadeia de igualdades

$$\sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) = \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[l]}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$\stackrel{(3.23)}{=} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{y}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[l]}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$\stackrel{(3.25)}{=} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) + \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u}) \cap I_{2\lambda}^{\leq} \cap I_{[l]}^{\geq}} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda)$$

$$\stackrel{(3.15)}{=} \sum_{i \in I_{1}(\mathbf{u})} (\omega(\mathbf{x})_{i} - 2\lambda) .$$

Finalmente, (3.10) também é satisfeita como uma igualdade, o que implica que $\mathbf{u} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$. Além disso, pela validade de (b) para \mathbf{u} e pelo fato de que $\mathbf{y} \in C_{l,s}$, \mathbf{y} também deve satisfazer (b) (com \mathbf{u} substituído por \mathbf{y}). Como já discutido, \mathbf{y} também satisfaz (a), completando a demonstração.

$$\operatorname{prox}_{h}(\mathbf{x}) = \left\{ \mathbf{U}_{\mathcal{A}(T)}\mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in P_{\mathcal{B}(T)}\left(\mathbf{x}_{\mathcal{A}(T)}\right), \ T \in \mathcal{T}(\mathbf{x}) \right\},\$$

em que

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \left\{ T \mid I_{[s]}^{\geq}(\mathbf{x}) \subsetneq T \subset I_{[s]}^{\geq}(\mathbf{x}), \ |T| = s \right\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda, \ \omega(\mathbf{x})_{[s]} > 2\lambda \\ \left\{ T \mid I_{[s]}^{\geq}(\mathbf{x}) \subset T \subset I_{[s]}^{\geq}(\mathbf{x}), \ |T| \leqslant s \right\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda, \ \omega(\mathbf{x})_{[s]} = 2\lambda \\ \left\{ T \mid I_{2\lambda}^{\geq}(\mathbf{x}) \subset T \subset I_{2\lambda}^{\geq}(\mathbf{x}), \ |T| < s \right\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda, \ \omega(\mathbf{x})_{[s]} < 2\lambda \\ \left\{ T \mid I_{[l]}^{\geq}(\mathbf{x}) \subsetneq T \subset I_{[l]}^{\geq}(\mathbf{x}), \ l \leqslant |T| \leqslant s \right\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} = 2\lambda \\ \left\{ T \mid I_{[l]}^{\geq}(\mathbf{x}) \subsetneq T \subset I_{[l]}^{\geq}(\mathbf{x}), \ |T| = l \right\}, & \omega(\mathbf{x})_{[l]} < 2\lambda \end{cases}$$

Essa caracterização sugere o seguinte algoritmo para calcular um elemento desse prox.

 Algorithm 5 Group sparse proximal mapping

 Input: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $l \leq s \leq m$ and $\lambda \in \mathbb{R}$

 Output: $\mathbf{u} \in \operatorname{prox}_h(\mathbf{x})$

 1: compute $S \in \mathcal{S}_s(\omega(\mathbf{x}))$ (arbitrarily chosen)

 2: if $\omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda$ then

 3: $T \leftarrow \{i \in S \mid \omega(\mathbf{x})_i > 2\lambda\}$

 4: else

 5: use S to compute $T \in \mathcal{S}_l(\omega(\mathbf{x}))$

 6: end if

 7: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{U}_{\mathcal{A}(T)}P_{\mathcal{B}(T)}(\mathbf{x}_{\mathcal{A}(T)})$

Repare que, caso $\omega(\mathbf{x})_{[l]} \leq 2\lambda$, seria somente necessário obter uma seleção $T \in \mathcal{S}_l(\omega(\mathbf{x}))$ de l dos maiores elementos de $\omega(\mathbf{x})$, que é mais fácil de calcular do que a seleção $S \in \mathcal{S}_s(\omega(\mathbf{x}))$ inicial quando l < s. Além disso, não há interesse em elementos $\omega(\mathbf{x})_i \leq 2\lambda$ no caso $\omega(\mathbf{x})_{[l]} > 2\lambda$, logo às vezes S pode ser reduzido. Dessa maneira, uma implementação mais detalhada poderia otimizar o esquema acima. Essa versão primeiro obteria a seleção de l elementos e buscaria sua menor componente, $\omega(\mathbf{x})_{[l]}$, para verificar a condição do esquema, terminando o processo caso $\omega(\mathbf{x})_{[l]} \leq 2\lambda$. Caso contrário, basta completar essa seleção até obter $S \in \mathcal{S}_s(\omega(\mathbf{x}))$ ou verificar que um novo elemento adicionado é menor ou igual à 2λ . Na implementação utilizada no Exemplo 3, contudo, não foi explorada essa estratégia, visto que a performance do algoritmo não está sendo avaliada.

Ademais, ao calcular $\omega(\mathbf{x})$ (3.7), especificamente no cálculo de d_{D_i} , em que a projeção em D_i precisa ser obtida, uma boa prática é salvar essa mesma projeção para reuso na construção dos grupos ativos $(P_{\mathcal{B}(T)})$ mais adiante.

4 Experimentos numéricos

O intuito dessa seção é comparar o NPG e ANPG com estratégias de passo espectral a métodos clássicos como PG, FISTA e outros encontrados na literatura para a modelagem ℓ_0 . Os experimentos visam não só analisar a eficácia do passo espectral, mas também o efeito do comportamento não monótono na sequência de iterados. Para isso, foi usado um conjunto de 25 problemas LASSO com dados reais compilados em (LOPES; SANTOS; SILVA, 2019) que foram reformulados com a regularização baseada na norma ℓ_0 .

Cada problema recebeu uma nova constante de penalização levando em consideração a mudança de regularização, $\lambda = \frac{0.1 \|\mathbf{A}^H \mathbf{b}\|_{\infty}^2}{2L_f}$, sendo $L_f = \lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$. Essa escolha de λ é pautada na caracterização do prox de $\|\cdot\|_0$ a partir de $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$ (mais detalhes no Exemplo 3). Todos os testes rodaram em Julia 1.8.2 no sistema operacional Windows 11 com um processador Intel Core i5 2.40GHz e 8 GB de RAM.

Primeiramente foi efetuada uma análise dos parâmetros do NPG. Várias abordagens foram propostas para lidar com funções objetivo não convexas, nas quais o tamanho do passo espectral pode se tornar negativo. Para o tamanho de passo inicial em cada iteração é usada a proposta em (DAI; AL-BAALI; YANG, 2015), que consiste em

$$\gamma_{k,0} \leftarrow \begin{cases} \gamma_k^{BBR}, & \gamma_k^{BBR} > 0\\ \frac{\|\mathbf{s}^k\|}{\|\mathbf{r}^k\|}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

em que γ_k^{BBR} é o passo espectral definido em (2.46). Essa escolha garante tamanhos positivos mesmo quando $\gamma_k^{BBR} < 0$ (o que ocorre em regiões não convexas de f). Note que, exceto quando $\mathbf{s}^k = \mathbf{0}$ (o que indicaria convergência do método), a fórmula acima retorna $\gamma_{k,0} > 0$. Portanto, supondo terminação finita dos algoritmos com os critérios de parada utilizados, $\exists \gamma_{\min} > 0$ implícito para a teoria do Algoritmo 1. O algoritmo resultante será referido como Nonmonotone Spectral Proximal Gradient method (NSPG).

O valor inicial na primeira iteração $\gamma_{0,0}$ foi obtido através da fórmula para o passo inicial acima entre o ponto inicial $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$ e $\mathbf{x}^0 + 10^{-5}\mathbf{1}$. Seguindo as sugestões em (KANZOW; MEHLITZ, 2021), inicialmente foram tomados $\tau = 0.25$, $\delta = 0.01$ e $\gamma_{\text{max}} = 10^{30}$. Uma bateria de testes sistemática foi então efetuada para determinar os valores de m mais adequados. Todos os métodos são terminados quando $\|\psi_k\|_{\infty} < \epsilon = 10^{-5}L_f$ ou k = 5000, recordando que ψ_k é a medida de estacionaridade definida em (2). Note que o critério de parada ϵ depende da constante de Lipschitz de cada problema. Essa estratégia foi necessária para garantir a convergência em um tempo razoável para problemas potencialmente muito mal condicionados (com $L_f \gg 0$). Os resultados podem ser observados na Figura 3. Vale ressaltar que em todos os experimentos, o cálculo da função objetivo F foi otimizado armazenando-se \mathbf{Ax} do cálculo do gradiente ∇f para reuso, e que esse número de avaliações de F foi omitido da análise porque sempre é equivalente ao número de avaliações de prox. A Subfigura 3(a) e Subfigura 3(b) mostram uma clara superioridade de m = 5. A leve discrepância entre esses gráficos expressa o número médio de buscas lineares extras em cada iteração, uma vez que no algoritmo sempre uma avaliação de ∇f é efetuada por iteração, enquanto mais de um cálculo proximal ocorre na busca linear. O propósito de apresentar ambos os gráficos juntos é fornecer uma ideia de quais variações resolvem os problemas em menos iterações em média, porém com o custo adicional de mais buscas lineares, ou vice-versa. Essa análise é importante uma vez que a complexidade dessas duas operações, ∇f e prox, é distinta, e a colocação dos métodos em tempo de CPU para convergência pode variar dependendo da magnitude dessa diferença.



Figura 3 – Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de m com a norma ℓ_0 .

Ao tratar de problemas não convexos nos quais múltiplos mínimos locais existem, outra dimensão comparativa pode ser explorada: a qualidade das soluções obtidas. A Subfigura 3(c) apresenta justamente isso. Como já averiguado em outras comparações de métodos não monótonos (por exemplo, em (KANZOW; MEHLITZ, 2021)), quanto maior a relaxação na monotonicidade (quanto maior m, nesse caso), há uma tendência de se obter soluções melhores. Isso se dá pela maior liberdade de deslocamento dos iterados para regiões mais distantes através da aceitação mais frequente de tamanhos de passo grandes. Dessa forma, as sequências são capazes de encontrar soluções distintas e potencialmente superiores. Esse fenômeno é particularmente visível na comparação entre m = 1 e m = 100.

Como previsto, certa não monotonicidade é desejável para melhor capturar as características benéficas do passo espectral, sendo um balanço ótimo dentre os candidatos testados encontrado em m = 5. Essa escolha condiz com experimentos e análises anteriores como os efetuados em (BARZILAI; BORWEIN, 1988). Para m maiores, a excessiva liberdade no critério de decréscimo acaba prejudicando a convergência. Caso sejam desejadas soluções melhores mesmo com o aumento nos recursos computacionais empregados, valores maiores de m podem ser uma alternativa viável. Outra estratégia é utilizar *multi-start* com um m mais eficiente.



Figura 4 – Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de τ com a norma ℓ_0 .

Fixando m = 5, os demais parâmetros foram testados, começando por τ . Na Figura 4, o parâmetro ótimo não é tão claro, com $\tau = 0.25$ e $\tau = 0.5$ sendo fortes candidatos. O valor $\tau = 0.25$ tem a tendência de ficar muito próximo ou mesmo ser o melhor em dado problema com mais frequência, enquanto $\tau = 0.5$ é um pouco mais robusto, especialmente na Subfigura 4(b). Durante a busca linear, valores altos de τ resultam em uma diminuição mais conservadora no tamanho de passo testado, aumentando o tamanho de passo médio aceito pelo critério. Isso, por sua vez, dá mais liberdade de movimento para a sequência e leva a melhores soluções (Subfigura 4(c)), assim como nos testes com valores de m mais altos. Em contrapartida, outra consequência é um aumento direto no número de passos testados nas buscas lineares. Uma análise da Figura 11 entre somente $\tau = 0.25$ e $\tau = 0.5$ demonstra a superioridade desse primeiro quanto à convergência, logo esse foi o valor escolhido.

Testes para determinar o parâmetro δ também foram efetuados e estão no Apêndice A. A variação deste parâmetro não gerou mudanças drásticas no comportamento dos métodos, e foi mantido então $\delta = 0.01$.

Já para o Algoritmo 2, seguindo as sugestões do método nmAPGLS de (LI; LIN, 2015), os passos espectrais foram definidos como

$$\gamma_k^{ABBR} = \frac{(\mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k)^T \mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k}{(\mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k)^T \mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k},$$

em que $\mathbf{s}_{\mathbf{x}}^{k} = \mathbf{x}^{k} - \mathbf{y}^{k}$ e $\mathbf{r}_{\mathbf{x}}^{k} = \nabla f(\mathbf{x}^{k}) - \nabla f(\mathbf{y}^{k})$, e

$$\alpha_k^{ABBR} = \frac{(\mathbf{s}_y^k)^T \mathbf{s}_y^k}{(\mathbf{s}_y^k)^T \mathbf{r}_y^k},$$

em que $\mathbf{s}_{\mathbf{y}}^{k} = \mathbf{y}^{k} - \mathbf{y}^{k-1}$ e $\mathbf{r}_{\mathbf{y}}^{k} = \nabla f(\mathbf{y}^{k}) - \nabla f(\mathbf{y}^{k-1})$. Os tamanhos de passo inicial para cada iteração são então analogamente escolhidos como

$$\gamma_{k,0} \leftarrow \begin{cases} \gamma_k^{ABBR}, & \gamma_k^{ABBR} > 0\\ \frac{\|\mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k\|}{\|\mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k\|}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$
$$\begin{pmatrix} \alpha_k^{ABBR}, & \alpha_k^{ABBR} > 0 \end{cases}$$

е

$$\alpha_{k,0} \leftarrow \begin{cases} \alpha_k^{ABBR}, & \alpha_k^{ABBR} > 0\\ \frac{\|\mathbf{s}_{\mathbf{y}}^k\|}{\|\mathbf{r}_{\mathbf{y}}^k\|}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Já $\alpha_{0,0}$ é tomado igual ao $\gamma_{0,0}$ do NSPG. Como $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$ por construção, a condição de decréscimo (2.33) é equivalente a (2.30), logo \mathbf{z}^1 (quando existe) é sempre aceito e $\gamma_{0,0}$ não precisa ser escolhido. O método resultante será denominado Accelerated Nonmonotone Spectral Proximal Gradient method (ANSPG).

A única análise de parâmetro efetuada para o ANSPG foi de n, sendo os demais parâmetros iguais aos obtidos pelos testes anteriores para o NSPG ($m = 5, \rho = \tau = 0.25, \beta = \delta = 0.01$ e $\alpha_{\text{max}} = \gamma_{\text{max}} = 10^{30}$). Como a sequência { $F(\mathbf{y}^k)$ } não obedece a nenhum critério de decréscimo, seja monótono ou não, é possível que algum $n \neq m = 5$ apresente comportamento superior. Uma vez que n = 1 é a escolha fixa presente no artigo base (LI; LIN, 2015), testar pelo menos essa alternativa parece razoável.

De fato, como visto na Figura 5, a diferença entre n = 5 e os demais é mais próxima que para o parâmetro m do NSPG. Apesar de n = 5 ganhar em número médio de sub-iterações nas buscas lineares (Subfigura 5(b)), ele causa convergência lenta em k, como visto na Subfigura 5(a). Uma possível explicação é que essa escolha gera condições de decréscimo (2.33) muito relaxadas, dado que $\{F(\mathbf{y}^k)\}$ é composta de valores relativamente mais altos, desacelerando assim o método. Esse efeito pode ser ainda potencializado pela maior frequência de rejeições em (2.30), resultando na avaliação de mais um gradiente e outra busca linear por iteração. A Subfigura 5(d), contudo, ainda aponta n = 5 como o melhor candidato no geral para esse problema. Reiteramos que esse poderia não ser o caso para outros problemas com balanços de complexidade entre prox e ∇f diferentes. A mesma tendência de relaxação na condição de decréscimo induzindo a obtenção de melhores soluções se repete aqui, sem grandes surpresas.



Figura 5 – Diferentes perfis de desempenho do ANSPG para diferentes valores de n com a norma ℓ_0 .

Um fator omitido que também afeta os tempos de execução é o número extra

de avaliações de $F(\mathbf{y}^k)$ que ocorrem em cada iteração. Como nem o número de avaliações de prox nem o de ∇f são equivalentes ao número de iterações em si, essa seria outra métrica para explicar os resultados da Subfigura 5(d).

Os algoritmos NSPG e ANSPG com parâmetros ajustados foram então comparados com alguns algoritmos da literatura, incluindo o nmAPGLS que inspirou o ANSPG e o recente newAPG_vs (LIU; WANG; LIU, 2024). Os métodos PG e FISTA foram executados com tamanho de passo $\frac{1}{L}$ com $L = 1.01 \cdot L_f$ como margem de segurança. Já para o método nmAPGLS, foram escolhidos os parâmetros propostos pelos autores, seguindo a nomenclatura original: $\rho = 0.4$, $\eta = 0.8$ e $\delta = 10^{-4}$. Para o newAPG_vs foram selecionados $Q_k = 0.99^k$, $E_k = k^{-1.1}$, $\mu_0 = 0.99$, $\mu_1 = 0.95$, $c = 10^4$ e $\delta = 0.8$, novamente pela recomendação dos autores. Para esses dois últimos métodos, seus respectivos tamanhos de passo iniciais na primeira iteração foram calculados da mesma forma que $\alpha_{0,0}$ e $\gamma_{0,0}$, visto que também são métodos com passos espectrais. A implementação de todos esses métodos pode ser conferida em https://github.com/GBelemBarbosa/Qualificacao. Os testes podem ser reproduzidos ou modificados seguindo as instruções no caderno 12-h_experiment.j1 e os dados obtidos nessa seção podem ser lidos e os perfis de desempenho editados através do caderno 12-h_load.j1.

Foram introduzidas outras duas variações do NSPG e ANSPG nas quais, após a rejeição do tamanho de passo inicial $\gamma_{k,0}$ ou $\alpha_{k,0}$ (no caso do ANSPG) na busca linear, é tomado o tamanho de passo dual (2.52) ao invés de multiplicar o passo por uma constante. Relembramos que esse passo é sempre menor ou igual ao primal (2.53). Essas versões foram chamadas de NHSPG e ANHSPG, respectivamente, em que 'H' representa *hybrid*. Dessa maneira, para o NHSPG,

$$\gamma_{k,1} \leftarrow \begin{cases} \gamma_k^{BBR2}, & \gamma_k^{BBR2} > 0\\ \frac{\|\mathbf{r}^k\|}{\|\mathbf{s}^k\|}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e, para o ANHSPG,

$$\gamma_{k,1} \leftarrow \begin{cases} \gamma_k^{ABBR2}, & \gamma_k^{ABBR2} > 0\\ \frac{\|\mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k\|}{\|\mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k\|}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

 $\alpha_{k,1} \leftarrow \begin{cases} \alpha_k^{ABBR2}, & \alpha_k^{ABBR2} > 0\\ \frac{\|\mathbf{r}_y^k\|}{\|\mathbf{s}^k\|}, & \text{caso contrário,} \end{cases}$

е

em que, intuitivamente, $\gamma_k^{ABBR2} = \frac{(\mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k)^T \mathbf{s}_{\mathbf{x}}^k}{(\mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k)^T \mathbf{r}_{\mathbf{x}}^k} e \alpha_k^{ABBR2} = \frac{(\mathbf{r}_{\mathbf{y}}^k)^T \mathbf{s}_{\mathbf{y}}^k}{(\mathbf{r}_{\mathbf{y}}^k)^T \mathbf{r}_{\mathbf{y}}^k}$. Após a primeira falha na busca, as subsequentes atualizações de passo seguem a mesma lógica que os algoritmos originais. É direto inferir que os mesmos resultados de convergência são válidos se assumirmos, sem perda de generalidade, $\gamma_{k,1}$ e/ou $\alpha_{k,1}$ (tamanhos de passo após a primeira
rejeição) como sendo os tamanhos de passo iniciais nas demonstrações quando necessário, isso é, se considerarmos $\gamma_{k,0} \leftarrow \gamma_{k,1}$ e $\alpha_{k,0} \leftarrow \alpha_{k,1}$.

Um ponto importante da análise é que nem para todos os métodos o número de avaliações de função objetivo é igual ao de avaliações de prox. Em específico, os métodos sem busca linear FISTA e PG não precisam calcular F, enquanto os métodos acelerados com busca linear, ANSPG, ANHSPG e nmAPGLS, precisam também calcular $F(\mathbf{y}^k)$ em cada iteração. Por fim, o newAPG_vs precisa calcular $f(\mathbf{y}^k)$ (mas não $h(\mathbf{y}^k)$) quando o passo a partir de \mathbf{y}^k é aceito. Mesmo otimizando esses cálculos como descrito anteriormente, essas diferenças nos métodos levam a leves discrepâncias nos posicionamentos em tempo de execução na Subfigura 6(d). Contudo, essa análise será omitida.



Figura 6 – Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a norma ℓ_0 .

Além disso, os tempos para avaliações necessários somente para o cálculo da medida de estacionaridade ψ_k são descontados do tempo final para manter a comparação mais justa. Um exemplo disso é que o método FISTA só calcula $\nabla f(\mathbf{y}^k)$ em cada iteração, porém $\nabla f(\mathbf{x}^k)$ é necessário para obter ψ_k , logo o tempo de cálculo desse último gradiente é descontado. Poderiam ser adotados outros critérios de convergência que favorecem um ou outro método ao reusar um valor já calculado durante a iteração. No entanto, como não foi encontrado um critério que seja imparcial a todos os métodos, optou-se pela estratégia de descontar o tempo de cômputo de ψ_k .

Alguns fenômenos são observados de imediato. Apesar do aparente bom desempenho do método FISTA em aspectos de convergência, a Subfigura 6(c) demonstra a clara superioridade dos métodos não monótonos sobre o PG e FISTA com passo $\frac{1}{L}$. Ambos os métodos convergem para soluções inferiores e muito provavelmente insatisfatórias na maioria dos contextos, exceto, talvez, quando é desejável evitar *overfitting*. Esse resultado demonstra uma das piores características de métodos monótonos em problemas não convexos com múltiplos mínimos locais e, ao nosso parecer, esse é o fator determinante em desencorajar seu uso.

Apesar da não convexidade, é notório que o método FISTA ainda se saiu melhor que o PG para uma grande porcentagem dos problemas na Subfigura 6(d). Esse método também se mantém competitivo até fatores de 4 com relação tanto ao nmAPGLS quanto ao ANSPG, métodos que tentam mitigar as deficiências desse primeiro na ausência de convexidade. Uma possível explicação para esse fenômeno é que o tamanho de passo $\frac{1}{L}$ utilizado é tão pequeno em alguns problemas que os iterados se mantêm em uma região relativamente convexa da função, assim facilitando as características de convergência rápida do FISTA (porém obtendo soluções inferiores).

Dentre os métodos algoritmicamente mais semelhantes, nmAPGLS e ANSPG (e ANHSPG), esse primeiro se demonstrou levemente superior. A maior diferença entre eles é na condição de decréscimo, sendo os métodos aqui introduzidos dotados da estratégia GLL em vez da HZ original. Essa mudança parece afetar especialmente problemas cuja convergência é problemática para ambos esses métodos, visto que a diferença em desempenho é mais notável para fatores altos do melhor.

As Figuras 12 e 13 mostram que as versões híbridas tanto do NSPG quanto do ANSPG são inferiores às originais. É preciso ressaltar que esse resultado vale para uma seleção de parâmetros voltada a otimizar as versões originais e que não foi ajustada para as híbridas. Por exemplo, a Figura 14 mostra que n = 2 é um valor mais favorável para o método ANHSPG, que agora se sai melhor que sua contra-parte não híbrida e chega mais próximo do método nmAPGLS.

O NSPG provou-se a melhor alternativa para esses problemas no geral. Isso se dá apesar de sua aparente simplicidade algorítmica e ausência de estratégias de aceleração que utilizam termos de inércia. Esse fato demonstra, acima de tudo, o potencial do passo espectral (auxiliado por buscas lineares não monótonas que permitam sua aceitação) em estratégias proximais.

Outras duas regularizações também foram testadas e se encontram no Apêndice A. Não foram realizadas novas seleções de parâmetros como aquelas para m, τ , $\delta \in n$ anteriores. O intuito desses testes é observar como o uso de regularizações convexas ou apenas localmente convexas afeta os métodos com aceleração tipo FISTA. É possível que esses métodos, especialmente aqueles com monitoramento, sejam capazes de se aproveitar da curvatura da função com essas regularizações na proximidade da solução. Para a regularização ℓ_0 nos casos estudados, no entanto, a descontinuidade e a não convexidade extrema da função objetivo não favoreceram os passos inerciais acelerados.

A primeira regularização testada foi a clássica modelagem LASSO com a norma ℓ_1 , que gera problemas convexos. A penalidade foi tomada como $\lambda = 0.1 \|\mathbf{A}^H \mathbf{b}\|_{\infty}$ seguindo o exemplo de diversos artigos na literatura (LOPES; SANTOS; SILVA, 2019). Essa escolha de λ também é pautada na caracterização do prox, agora de $\|\cdot\|_1$, a partir de $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$.

Outra regularização testada, chamada de *Minimax Convex Penalty* (MCP), foi encontrada em (SHEN; SUTER; TRIPP, 2018). Ela pode ser entendida como uma hibridização das normas $\ell_0 \in \ell_1 \in \acute{e}$ definida como $(\|\cdot\|_1)_{\alpha} := \|\cdot\|_1 - \operatorname{env}_{\alpha\|\cdot\|_1}$, sendo $\operatorname{env}_{\alpha f}$ o envelope de Moreau de f com parâmetro α (BECK, 2017, Seção 6.7).



Figura 7 – (a) Os gráficos de $\|\cdot\|_1$ (sólido), $\operatorname{env}_{\alpha\|\cdot\|_1}$ (pontilhado) e (b) o gráfico de $(\|\cdot\|_1)_{\alpha}$, ambos em uma única variável. Próximo à origem, $(\|\cdot\|_1)_{\alpha}$ retém a estrutura de $\|\cdot\|_1$, enfatizada em preto (sólido-pontilhado). Fonte: (SHEN; SUTER; TRIPP, 2018).

O fator λ de penalização foi tomado como o mesmo do modelo ℓ_1 , enquanto o α da MCP foi escolhido tal que $\frac{\lambda \alpha}{2}$, a altura máxima da MCP (veja Figura 7 (b)), seja igual ao λ do modelo ℓ_0 . Dessa forma, a inclinação da MCP próxima à origem é igual àquela do modelo ℓ_1 , e o valor constante máximo da MCP é igual ao valor máximo do modelo ℓ_0 , produzindo assim uma combinação dos dois últimos testes. Essa função é próxima de ser convexa em torno da origem, o que pode beneficiar a convergência de certos métodos. Porém, ela ainda retém algumas das características desejáveis da regularização descontínua $\|\cdot\|_0$ e do seu operador proximal. Além disso, o cálculo do operador proximal MCP possui fórmula fechada e é análogo ao das demais normas em termos de complexidade.

Os resultados desses testes não serão abordados em detalhes, porém na Figura 8, que agrupa os perfis de tempo de convergência para os 3 modelos, algumas tendências gerais podem ser identificadas. Primeiramente no problema com a norma ℓ_1 , o método FISTA se aproxima de outros métodos acelerados com monitoramento e tem clara superioridade ao PG, como é de se esperar dada a ausência da não-convexidade. Um resultado curioso é que os métodos NSPG e NHSPG se provaram ainda mais dominantes nesse cenário, apesar da convexidade em teoria beneficiar métodos acelerados. A ordem entre ANSPG, ANHSPG e nmAPGLS inverteu-se completamente, porém as diferenças aparentam ser tão mínimas e inconsistentes, principalmente se considerados os três modelos em conjunto, que pouco se pode afirmar com exatidão.

Já para a regularização MCP, métodos com aceleração ou não performam de forma mais próxima. Entretanto, é difícil determinar somente com esses testes se são as estratégias aceleradas que se saíram melhor em um problema localmente convexo ou se essa regularização diminuiu a vantagem dos métodos NSPG e NHSPG. É também de interesse que o método FISTA teve seu melhor resultado comparativo nesse problema, melhor até que no caso da norma ℓ_1 para o qual foi originalmente desenvolvido.



Figura 8 – Perfis de desempenho de tempo de CPU para diferentes regularizações.

5 Considerações finais

Há muito a se explorar no contexto de problemas compósitos descontínuos. O recente interesse na norma ℓ_0 abriu possibilidades tanto em novos modelos para problemas antigos quanto na busca de algoritmos eficientes para solucioná-los. Existe uma enorme gama de estratégias com históricos ricos em problemas quadráticos, compósitos convexos e não convexos, compósitos ou não, que merecem ser investigadas e comparadas nessa nova classe de modelos.

Foi demonstrado numericamente que os métodos se beneficiam de forma geral de esquemas não monótonos. Os resultados numéricos preliminares entre ANSPG e nmAPGLS apontam que até mesmo uma avaliação do esquema de busca não monótona empregado possui mérito. Além das GLL e HZ, outras estratégias adaptativas foram sugeridas em (DAI; FLETCHER, 2005b; DAI; ZHANG, 2001) e examinadas novamente com a introdução de passos cíclicos em (DAI et al., 2005; HAGER; ZHANG, 2006).

Ainda resta observar se os mesmos resultados da Capítulo 4 se repetem no caso $f \notin C_{L_f}^{1,1}$, para o qual a teoria de (KANZOW; MEHLITZ, 2021) foi desenvolvida. Um dos fatores negativos em testar os métodos aqui comparados nesse problema é que não existe teoria de convergência correspondente, exceto para o NPG e ANPG. Por esse motivo, pretendemos continuar inicialmente nossa pesquisa contrastando diferentes estratégias de tamanhos de passo e operadores proximais para esses dois últimos esquemas não monótonos.

De fato, comparado com a ampla literatura disponível sobre estratégias de passo com características espectrais, fica evidente que outras estratégias de tamanho de passo, além da BBR, devem ser testadas. A Subseção 2.3.3 apresenta diversas opções com motivações teóricas distintas que podem se provar úteis no contexto proximal descontínuo. Utilizar outros operadores proximais com o intuito de capturar mais informação de segunda ordem (Subseção 2.3.4) é outra alternativa, cujas fundamentações em métodos quasi-Newton são análogas às do passo espectral. Somente nesse último tópico já se identificam diversas vertentes de pesquisa futura.

Além disso, é de interesse explorar a implementação e análise de avaliações inexatas de função, gradiente e operador proximal nos métodos estudados. Dessa maneira, serão examinados cenários nos quais avaliações exatas podem ser computacionalmente caras ou impossíveis pela ausência teórica de expressões fechadas explícitas.

Por fim, as propriedades induzidas na solução por funções descontínuas (em especial a norma ℓ_0) podem levar a uma série de novos modelos de potencial prático em diversos campos, como visto no Exemplo 2 e Exemplo 3. Com devida experimentação,

é possível que essas alternativas se tornem um novo padrão para certas aplicações que atualmente utilizam outras regularizações, ou até mesmo gerem interesse em utilizar otimização compósita onde antes ela não era considerada viável.

Referências

AKAIKE, H. On a successive transformation of probability distribution and its application to the analysis of the optimum gradient method. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 11, n. 1, p. 1–16, out. 1959. ISSN 1572-9052. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1007/bf01831719. Citado na página 43.

ANDREI, N. A diagonal quasi-newton updating method for unconstrained optimization. *Numerical Algorithms*, v. 81, 06 2019. Citado na página 50.

ARAVKIN, A. Y.; BARALDI, R.; ORBAN, D. A proximal quasi-newton trust-region method for nonsmooth regularized optimization. *SIAM Journal on Optimization*, v. 32, n. 2, p. 900–929, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1137/21M1409536. Citado na página 48.

ASMUNDIS, R. D.; SERAFINO, D. di; HAGER, W. W.; TORALDO, G.; ZHANG, H. An efficient gradient method using the yuan steplength. *Computational Optimization and Applications*, v. 59, p. 541 – 563, 2014. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:254415074. Citado na página 47.

BARZILAI, J.; BORWEIN, J. M. Two-Point Step Size Gradient Methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 8, n. 1, p. 141–148, 01 1988. ISSN 0272-4979. Disponível em: https://doi.org/10.1093/imanum/8.1.141. Citado 6 vezes nas páginas 6, 8, 20, 42, 43 e 69.

BECK, A. *First-Order Methods in Optimization*. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2017. Disponível em: https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137 /1.9781611974997. Citado 3 vezes nas páginas 16, 17 e 75.

BECK, A.; ELDAR, Y. C. Sparsity Constrained Nonlinear Optimization: Optimality Conditions and Algorithms. arXiv, 2012. Disponível em: https://arxiv.org/abs/1203.4580. Citado 3 vezes nas páginas 14, 17 e 52.

BECK, A.; HALLAK, N. On the minimization over sparse symmetric sets: Projections, optimality conditions, and algorithms. *Mathematics of Operations Research*, INFORMS, v. 41, n. 1, p. 196–223, 2016. ISSN 0364765X, 15265471. Disponível em: http://www.jstor.org/stable/24736319. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 52.

_____. Optimization problems involving group sparsity terms. *Mathematical Programming*, v. 178, p. 1–29, 04 2018. Citado 11 vezes nas páginas 6, 8, 14, 15, 17, 52, 53, 54, 58, 60 e 61.

_____. Proximal mapping for symmetric penalty and sparsity. *SIAM Journal on Optimization*, v. 28, n. 1, p. 496–527, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1137/17M1 116544. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 52.

BECK, A.; TEBOULLE, M. Fast gradient-based algorithms for constrained total variation image denoising and deblurring problems. *IEEE Transactions on Image Processing*, v. 18, n. 11, p. 2419–2434, 2009. Citado 4 vezes nas páginas 6, 8, 15 e 35.

_____. A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, v. 2, n. 1, p. 183–202, 2009. Disponível em: https://doi.org/10.1137/080716542. Citado 3 vezes nas páginas 6, 8 e 15.

BIRGIN, E. G.; MARTÍNEZ, J. M.; RAYDAN, M. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM Journal on Optimization*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), v. 10, n. 4, p. 1196–1211, jan. 2000. ISSN 1095-7189. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1137/s1052623497330963. Citado na página 46.

_____. Inexact spectral projected gradient methods on convex sets. *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 23, n. 4, p. 539–559, 10 2003. ISSN 0272-4979. Disponível em: https://doi.org/10.1093/imanum/23.4.539. Citado na página 46.

_____. Spectral projected gradient methods: Review and perspectives. Journal of Statistical Software, Foundation for Open Access Statistic, v. 60, n. 3, 2014. ISSN 1548-7660. Disponível em: http://dx.doi.org/10.18637/jss.v060.i03. Citado na página 46.

BOLTE, J.; SABACH, S.; TEBOULLE, M.; VAISBOURD, Y. First order methods beyond convexity and lipschitz gradient continuity with applications to quadratic inverse problems. *SIAM Journal on Optimization*, v. 28, n. 3, p. 2131–2151, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1137/17M1138558. Citado na página 20.

BOŢ, R. I.; CSETNEK, E. R.; LÁSZLÓ, S. C. An inertial forward-backward algorithm for the minimization of the sum of two nonconvex functions. *EURO Journal on Computational Optimization*, v. 4, n. 1, p. 3–25, 2016. ISSN 2192-4406. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2192440621000526. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 20.

BREGMAN, L. The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, Elsevier BV, v. 7, n. 3, p. 200–217, jan. 1967. ISSN 0041-5553. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/0041-5553(67)90040-7. Citado na página 18.

BURDAKOV, O.; DAI, Y.-H.; HUANG, N. *Stabilized Barzilai-Borwein method.* 2019. Disponível em: https://arxiv.org/abs/1907.06409. Citado na página 47.

CAUCHY, A.-L. Méthodc générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées. In: . [s.n.], 1847. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:123755271. Citado na página 42.

DAI, Y.; YUAN, Y. xiang. Analysis of monotone gradient methods. *Journal of Industrial and Management Optimization*, v. 1, n. 2, p. 181–192, 2005. ISSN 1547-5816. Disponível em: https://www.aimsciences.org/article/id/d1aab010-c7e0-4438-b967-f7f471294338. Citado na página 47.

DAI, Y.-H. R-linear convergence of the barzilai and borwein gradient method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Oxford University Press (OUP), v. 22, n. 1, p. 1–10, jan. 2002. ISSN 1464-3642. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1093/imanum/22.1.1. Citado na página 43.

DAI, Y.-H.; AL-BAALI, M.; YANG, X. A positive barzilai–borwein-like stepsize and an extension for symmetric linear systems. In: _____. [S.l.: s.n.], 2015. p. 59–75. ISBN 978-3-319-17688-8. Citado na página 67.

DAI, Y.-H.; FLETCHER, R. On the asymptotic behaviour of some new gradient methods. *Mathematical Programming*, Springer Science and Business Media LLC, v. 103, n. 3, p. 541–559, fev. 2005. ISSN 1436-4646. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1007/s10107-004-0516-9. Citado na página 46.

_____. Projected barzilai-borwein methods for large-scale box-constrained quadratic programming. *Numerische Mathematik*, v. 100, p. 21–47, 03 2005. Citado 3 vezes nas páginas 22, 48 e 77.

DAI, Y.-H.; HAGER, W.; SCHITTKOWSKI, K.; ZHANG, H. The cyclic barzilai–borwein method for unconstrained optimization. *IMA Journal of Numerical Analysis*, v. 26, 10 2005. Citado 3 vezes nas páginas 23, 47 e 77.

DAI, Y.-H.; YANG, X. A new gradient method with an optimal stepsize property. *Computational Optimization and Applications*, v. 33, p. 73–88, 02 2006. Citado na página 47.

DAI, Y.-H.; YUAN, J.-Y.; YUAN, Y.-x. Modified two-point stepsize gradient methods for unconstrained optimization. *Computational Optimization and Applications*, v. 22, p. 103–109, 04 2002. Citado na página 47.

DAI, Y.-H.; ZHANG, H. Adaptive two-point stepsize gradient algorithm. *Numerical Algorithms*, v. 27, p. 377–385, 08 2001. Citado na página 77.

DENNIS JR., J. E.; MORé, J. J. Quasi-newton methods, motivation and theory. *SIAM Review*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), v. 19, n. 1, p. 46–89, jan. 1977. ISSN 1095-7200. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1137/1019005. Citado na página 44.

FLETCHER, R. Low storage methods for unconstrained optimization. In: _____. [S.l.: s.n.], 1990. p. 165–179. Citado na página 43.

FORSYTHE, G. E. On the asymptotic directions of thes-dimensional optimum gradient method. *Numerische Mathematik*, Springer Science and Business Media LLC, v. 11, n. 1, p. 57–76, jan. 1968. ISSN 0945-3245. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1007/bf02165472. Citado na página 43.

FRASSOLDATI, G.; ZANNI, L.; ZANGHIRATI, G. On adaptive step-size selections in gradient methods. *Pamm*, v. 7, p. 1061903–1061904, 12 2007. Citado na página 47.

FRIEDLANDER, A.; MARTÍNEZ, J. M.; MOLINA, B.; RAYDAN, M. Gradient method with retards and generalizations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 36, 11 1999. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 46.

GRIPPO, L.; LAMPARIELLO, F.; LUCIDI, S. A nonmonotone line search technique for newton's method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 23, n. 4, p. 707–716, 1986. ISSN 00361429. Disponível em: http://www.jstor.org/stable/2157617. Citado 3 vezes nas páginas 22, 43 e 51.

GRIPPO, L.; SCIANDRONE, M. Nonmonotone globalization techniques for the barzilai-borwein gradient method. *Computational Optimization and Applications*, v. 23, p. 143–169, 2002. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:11159074. Citado na página 47.

HAGER, W.; ZHANG, H. A new active set algorithm for box constrained optimization. SIAM Journal on Optimization, v. 17, p. 526–557, 01 2006. Citado na página 77.

HESTENES, M.; STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, National Institute of Standards and Technology (NIST), v. 49, n. 6, p. 409, dez. 1952. ISSN 0091-0635. Disponível em: http://dx.doi.org/10.6028/jres.049.044. Citado na página 43.

HUANG, Y.; DAI, Y.; LIU, X.; ZHANG, H. On the asymptotic convergence and acceleration of gradient methods. *Journal of Scientific Computing*, v. 90, 2019. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:201103838. Citado na página 47.

HUANG, Y.; DAI, Y.-H.; LIU, X.-W.; ZHANG, H. Gradient methods exploiting spectral properties. 2019. Citado na página 47.

HUANG, Y.; LIU, H. A barzilai-borwein type method for minimizing composite functions. *Numerical Algorithms*, v. 69, p. 819 – 838, 2014. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:17084614. Citado na página 17.

KANZOW, C.; MEHLITZ, P. Convergence properties of monotone and nonmonotone proximal gradient methods revisited. *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 195, p. 624 – 646, 2021. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID: 244896538. Citado 14 vezes nas páginas 6, 8, 14, 15, 20, 22, 23, 25, 28, 32, 33, 67, 69 e 77.

LECONTE, G.; ORBAN, D. The indefinite proximal gradient method. *Computational Optimization and Applications*, 2024. ISSN 1573-2894. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s10589-024-00604-5. Citado 5 vezes nas páginas 17, 18, 19, 48 e 51.

LI, D.; SUN, R. On a faster r-linear convergence rate of the barzilai-borwein method. *ArXiv*, abs/2101.00205, 2021. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID: 230435962. Citado na página 43.

LI, H.; LIN, Z. Accelerated proximal gradient methods for nonconvex programming. In: CORTES, C.; LAWRENCE, N.; LEE, D.; SUGIYAMA, M.; GARNETT, R. (Ed.). Advances in Neural Information Processing Systems. Curran Associates, Inc., 2015. v. 28. Disponível em: https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2015/file/f7664060cc52 bc6f3d620bcedc94a4b6-Paper.pdf. Citado 8 vezes nas páginas 6, 8, 15, 20, 34, 36, 70 e 71.

LIU, H.; WANG, T.; LIU, Z. A nonmonotone accelerated proximal gradient method with variable stepsize strategy for nonsmooth and nonconvex minimization problems. *Journal of Global Optimization*, 03 2024. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 72.

LOPES, R.; SANTOS, S. A.; SILVA, P. J. d. S. Accelerating block coordinate descent methods with identification strategies. *Computational Optimization and Applications*, v. 72, p. 609–640, 2019. ISSN 1573-2894. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s10589-018-00056-8. Citado 3 vezes nas páginas 57, 67 e 75.

LUENGO, F.; RAYDAN, M. Gradient method with dynamical retards for large-scale optimization problems. *Electronic transactions on numerical analysis ETNA*, v. 16, p. 186–193, 01 2003. Citado na página 47.

MORDUKHOVICH, B. Variational analysis and applications. [S.l.]: Springer, Berlin, 2018. Citado na página 16.

MORÉ, J. J.; SORENSEN, D. C. Computing a trust region step. *Siam Journal* on *Scientific and Statistical Computing*, v. 4, p. 553–572, 1983. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:56112357. Citado na página 31.

MOREAU, J. J. Fonctions convexes duales et points proximaux dans un espace hilbertien. Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences, Gauthier-Villars, v. 255, p. 2897–2899, 1962. Disponível em: https://hal.science/hal-01867195. Citado na página 17.

OSHER, S.; BURGER, M.; GOLDFARB, D.; XU, J.; YIN, W. An iterative regularization method for total variation-based image restoration. *Multiscale Modeling and amp; Simulation*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), v. 4, n. 2, p. 460–489, jan. 2005. ISSN 1540-3467. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1137/040605412. Citado na página 18.

PATRINOS, P.; BEMPORAD, A. Proximal newton methods for convex composite optimization. In: *52nd IEEE Conference on Decision and Control.* [S.l.: s.n.], 2013. p. 2358–2363. Citado na página 51.

RAYDAN, M. On the barzilai and borwein choice of steplength for the gradient method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Oxford University Press (OUP), v. 13, n. 3, p. 321–326, 1993. ISSN 1464-3642. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1093/imanum/13.3.321. Citado 5 vezes nas páginas 20, 42, 43, 45 e 46.

_____. The barzilai and borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM Journal on Optimization*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), v. 7, n. 1, p. 26–33, fev. 1997. ISSN 1095-7189. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1137/s1052623494266365. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 43.

SHEN, L.; SUTER, B. W.; TRIPP, E. E. Structured Sparsity Promoting Functions. 2018. Disponível em: https://arxiv.org/abs/1809.06777. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 75.

THEMELIS, A.; STELLA, L.; PATRINOS, P. Forward-backward envelope for the sum of two nonconvex functions: Further properties and nonmonotone linesearch algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), v. 28, n. 3, p. 2274–2303, jan. 2018. ISSN 1095-7189. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1137/16M1080240. Citado 3 vezes nas páginas 17, 48 e 51.

TIBSHIRANI, R. Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society (Series B)*, v. 58, p. 267–288, 1996. Citado na página 54.

WU, Z.; LI, C.; LI, M.; LIM, A. Inertial proximal gradient methods with bregman regularization for a class of nonconvex optimization problems. *Journal of Global Optimization*, v. 79, p. 1–28, 03 2021. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 20.

ZHANG, H.; HAGER, W. W. A nonmonotone line search technique and its application to unconstrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, v. 14, n. 4, p. 1043–1056, 2004. Disponível em: https://doi.org/10.1137/S1052623403428208. Citado na página 34.

ZHU, M.; NAZARETH, J. L.; WOLKOWICZ, H. The quasi-cauchy relation and diagonal updating. *SIAM J. Optim.*, v. 9, p. 1192–1204, 1999. Disponível em: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:949459. Citado na página 50.

Apêndices

APÊNDICE A – Gráficos adicionais



Figura 9 – Espectrograma obtido com 20% das amostras não uniformemente espaçadas e $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}.$



Figura 10 – Diferentes perfis de desempenho do NSPG para diferentes valores de δ com a norma $\ell_0.$



Figura 11 – Diferentes perfis de desempenho do NSPG para dois valores de τ com a norma $\ell_0.$



Figura 12 – Diferentes perfis de desempenho entre NSPG e NHSPG com a norma ℓ_0 .



Figura 13 – Diferentes perfis de desempenho entre ANSPG e ANHSPG com a norma ℓ_0 .



Figura 14 – Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos acelerados com a norma $\ell_0.$



Figura 15 – Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a norma ℓ_1 .



Figura 16 – Diferentes perfis de desempenho para diferentes métodos com a regularização MCP.