

Otimização Contínua: Aspectos teóricos e computacionais

Ademir Alves Ribeiro
Elizabeth Wegner Karas

Cap. 6 - Implementação Computacional

- 1 Banco de funções
- 2 Implementação dos algoritmos
- 3 Métodos de otimização irrestrita
- 4 Comparação de diferentes algoritmos

Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe $\mathcal{C}^2$.

- Entrada:

- um ponto $x \in \mathbb{R}^n$
- um parâmetro $\text{ordem} \in \{0, 1, 2\}$

- Saída:

- valor de $f(x)$, se $\text{ordem} = 0$
- vetor gradiente $\nabla f(x)$, se $\text{ordem} = 1$
- Hessiana $\nabla^2 f(x)$, se $\text{ordem} = 2$.

Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe $\mathcal{C}^2$.

- **Entrada:**

- um ponto $x \in \mathbb{R}^n$
- um parâmetro $\text{ordem} \in \{0, 1, 2\}$

- **Saída:**

- valor de $f(x)$, se $\text{ordem} = 0$
- vetor gradiente $\nabla f(x)$, se $\text{ordem} = 1$
- Hessiana $\nabla^2 f(x)$, se $\text{ordem} = 2$.

Considere $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe $\mathcal{C}^2$.

- **Entrada:**

- um ponto $x \in \mathbb{R}^n$
- um parâmetro $\text{ordem} \in \{0, 1, 2\}$

- **Saída:**

- valor de $f(x)$, se $\text{ordem} = 0$
- vetor gradiente $\nabla f(x)$, se $\text{ordem} = 1$
- Hessiana $\nabla^2 f(x)$, se $\text{ordem} = 2$.

Dados de entrada: $x \in \mathbb{R}^n$, $\text{ordem} \in \{0, 1, 2\}$

SE $\text{ordem} = 0$

$$y = f(x)$$

SENÃO, SE $\text{ordem} = 1$

$$y = \nabla f(x)$$

SENÃO, SE $\text{ordem} = 2$

$$y = \nabla^2 f(x)$$

SENÃO

MENSAGEM: Erro na variável ordem !

Banco de funções - Exemplo

Implemente a rotina para $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ e use-a para avaliar a função, o gradiente e a Hessiana no ponto $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.

SE order = 0

$$y = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$$

SENÃO, SE ordem = 1

$$y = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 12x_2 \end{pmatrix}$$

SENÃO, SE ordem = 2

$$y = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 12 \end{pmatrix}$$

SENÃO

MENSAGEM: Erro na variável ordem!

Rotina para gerar uma matriz simétrica arbitrária

Implemente uma rotina que, dados a dimensão n do espaço e dois reais $\lambda_1 < \lambda_n$, forneça uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ cujos autovalores estejam uniformemente distribuídos entre λ_1 e λ_n . Use a rotina implementada para gerar uma matriz simétrica 4×4 com autovalores entre $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_n = 100$.

Rotina

Dados de entrada: $n \in \mathbb{N}$, $\lambda_1 < \lambda_n$

$u = \text{rand}(n, 1)$ (vetor randômico com componentes entre 0 e 1)

$$v = \lambda_1 + \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\max(u) - \min(u)} (u - \min(u)) e$$

Obtenha uma matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal

$$A = Q^T \text{diag}(v) Q$$

Um matriz ortogonal $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser gerada pela decomposição QR de uma matriz arbitrária em $\mathbb{R}^{n \times n}$.

Rotina para gerar uma matriz simétrica arbitrária

Implemente uma rotina que, dados a dimensão n do espaço e dois reais $\lambda_1 < \lambda_n$, forneça uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ cujos autovalores estejam uniformemente distribuídos entre λ_1 e λ_n . Use a rotina implementada para gerar uma matriz simétrica 4×4 com autovalores entre $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_n = 100$.

Rotina

Dados de entrada: $n \in \mathbb{N}$, $\lambda_1 < \lambda_n$

$u = \text{rand}(n, 1)$ (vetor randômico com componentes entre 0 e 1)

$$v = \lambda_1 + \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\max(u) - \min(u)} (u - \min(u)) e$$

Obtenha uma matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal

$$A = Q^T \text{diag}(v) Q$$

Um matriz ortogonal $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser gerada pela decomposição QR de uma matriz arbitrária em $\mathbb{R}^{n \times n}$.

Rotina para gerar uma matriz simétrica arbitrária

Implemente uma rotina que, dados a dimensão n do espaço e dois reais $\lambda_1 < \lambda_n$, forneça uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ cujos autovalores estejam uniformemente distribuídos entre λ_1 e λ_n . Use a rotina implementada para gerar uma matriz simétrica 4×4 com autovalores entre $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_n = 100$.

Rotina

Dados de entrada: $n \in \mathbb{N}$, $\lambda_1 < \lambda_n$

$u = \text{rand}(n, 1)$ (vetor randômico com componentes entre 0 e 1)

$$v = \lambda_1 + \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\max(u) - \min(u)} (u - \min(u)) e$$

Obtenha uma matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal

$$A = Q^T \text{diag}(v) Q$$

Um matriz ortogonal $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pode ser gerada pela decomposição QR de uma matriz arbitrária em $\mathbb{R}^{n \times n}$.

Família de 35 funções dadas como somatório de quadrados, da forma

$$f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2,$$

onde $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, são funções dadas.

O código em Matlab e em Fortran deste banco de funções está disponível em http://www.mat.univie.ac.at/~neum/glopt/test.html#test_unconstr

Referência

J. J. Moré, B. S. Garbow, and K. E. Hillstom.

Testing unconstrained optimization software.

ACM Transactions on Mathematical Software, 7(1):17–41, 1981.

Família de 35 funções dadas como somatório de quadrados, da forma

$$f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2,$$

onde $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, são funções dadas.

O código em Matlab e em Fortran deste banco de funções está disponível em http://www.mat.univie.ac.at/~neum/glopt/test.html#test_unconstr

Referência

J. J. Moré, B. S. Garbow, and K. E. Hillstom.

Testing unconstrained optimization software.

ACM Transactions on Mathematical Software, 7(1):17–41, 1981.

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\text{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz J , cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor fvec e a matriz J , se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \text{fvec}^T \text{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2J^T \text{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\text{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz J , cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor fvec e a matriz J , se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \text{fvec}^T \text{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2J^T \text{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\text{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz J , cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor fvec e a matriz J , se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \text{fvec}^T \text{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2J^T \text{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\text{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz $\mathbf{J}$, cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor fvec e a matriz $\mathbf{J}$, se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \text{fvec}^T \text{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2 \mathbf{J}^T \text{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\text{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz $\mathbf{J}$, cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor fvec e a matriz $\mathbf{J}$, se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \text{fvec}^T \text{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2 \mathbf{J}^T \text{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Cada função tem quatro dados de entrada:

- dimensão n do espaço;
- o número m de funções usadas para definir a função objetivo;
- o ponto $x \in \mathbb{R}^n$ onde se deseja calculá-la;
- um parâmetro $\text{opt} \in \{1, 2, 3\}$.

A versão implementada de cada função fornece:

- o vetor $\mathbf{fvec} \in \mathbb{R}^m$ cuja i -ésima componente é o valor $f_i(x)$, se $\text{opt} = 1$.
- a matriz Jacobiana de $(f_1, f_2, \dots, f_m)$, isto é, uma matriz $\mathbf{J}$, cuja i -ésima linha é $\nabla f_i(x)^T$, se $\text{opt} = 2$.
- vetor $\mathbf{fvec}$ e a matriz $\mathbf{J}$, se $\text{opt} = 3$.

Note que nesta notação a função $f(x) = \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2$ pode ser escrita como

$$f(x) = \mathbf{fvec}^T \mathbf{fvec}$$

e o gradiente de f pode ser calculado como

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = 2 \mathbf{J}^T \mathbf{fvec}$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Para as seguintes funções, calcule o vetor $fvec$, a matriz J , o valor de f e seu gradiente no ponto x^0 fornecido

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Indicamos abaixo o ponto x^0 , o valor de f e do seu gradiente neste ponto.

$$(a) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 24.2 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix};$$

$$(b) \quad x^0 = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 4171.3 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 33796.6 \\ 87402.1 \end{pmatrix};$$

$$(c) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \\ -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 48.4 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \\ -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}.$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Para as seguintes funções, calcule o vetor $fvec$, a matriz J , o valor de f e seu gradiente no ponto x^0 fornecido

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Indicamos abaixo o ponto x^0 , o valor de f e do seu gradiente neste ponto.

$$(a) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 24.2 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix};$$

$$(b) \quad x^0 = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 4171.3 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 33796.6 \\ 87402.1 \end{pmatrix};$$

$$(c) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \\ -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 48.4 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \\ -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}.$$

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Para as seguintes funções, calcule o vetor $fvec$, a matriz J , o valor de f e seu gradiente no ponto x^0 fornecido

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Indicamos abaixo o ponto x^0 , o valor de f e do seu gradiente neste ponto.

(a) $x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 24.2$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}$;

(b) $x^0 = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 4171.3$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 33796.6 \\ 87402.1 \end{pmatrix}$;

(c) $x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \\ -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 48.4$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \\ -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}$.

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Para as seguintes funções, calcule o vetor $fvec$, a matriz J , o valor de f e seu gradiente no ponto x^0 fornecido

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Indicamos abaixo o ponto x^0 , o valor de f e do seu gradiente neste ponto.

(a) $x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 24.2$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}$;

(b) $x^0 = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 4171.3$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 33796.6 \\ 87402.1 \end{pmatrix}$;

(c) $x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \\ -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}$, $f(x^0) = 48.4$ e $\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \\ -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}$.

Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Para as seguintes funções, calcule o vetor $fvec$, a matriz J , o valor de f e seu gradiente no ponto x^0 fornecido

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Indicamos abaixo o ponto x^0 , o valor de f e do seu gradiente neste ponto.

$$(a) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 24.2 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix};$$

$$(b) \quad x^0 = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.4 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 4171.3 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 33796.6 \\ 87402.1 \end{pmatrix};$$

$$(c) \quad x^0 = \begin{pmatrix} -1.2 \\ 1 \\ -1.2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f(x^0) = 48.4 \quad \text{e} \quad \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -215.6 \\ -88.0 \\ -215.6 \\ -88.0 \end{pmatrix}.$$

Interface - Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: `FUNC = rosen`, `mm = 2`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: `FUNC = jensam`, `mm = 10`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: `FUNC = rosex`, `mm = 4`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Interface - Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: `FUNC = rosen`, `mm = 2`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: `FUNC = jensam`, `mm = 10`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: `FUNC = rosex`, `mm = 4`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Interface - Banco de funções de Moré, Garbow e Hillstom

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: `FUNC = rosen`, `mm = 2`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: `FUNC = jensam`, `mm = 10`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: `FUNC = rosex`, `mm = 4`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: `FUNC = rosen`, `mm = 2`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: `FUNC = jensam`, `mm = 10`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: `FUNC = rosex`, `mm = 4`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: $\text{FUNC} = \text{rosen}$, $\text{mm} = 2$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: $\text{FUNC} = \text{jensam}$, $\text{mm} = 10$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: $\text{FUNC} = \text{rosex}$, $\text{mm} = 4$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: `FUNC = rosen`, `mm = 2`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: `FUNC = jensam`, `mm = 10`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: `FUNC = rosex`, `mm = 4`,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Teste a rotina anterior para calcular o valor da função e do seu gradiente no ponto x^0 fornecido, para as funções abaixo e compare com os resultados obtidos anteriormente.

- (a) Rosenbrock, numerada como (1) no artigo.
- (b) Jennrich e Sampson, numerada como (6), com $m = 10$.
- (c) Extended Rosenbrock, numerada como (21), com $n = 4$ e $m = n$.

Solução

Defina variáveis globais: FUNC e mm

- (a) Rosenbrock: $\text{FUNC} = \text{rosen}$, $\text{mm} = 2$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (b) Jennrich e Sampson: $\text{FUNC} = \text{jensam}$, $\text{mm} = 10$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$;
- (c) Extended Rosenbrock: $\text{FUNC} = \text{rosex}$, $\text{mm} = 4$,
 $f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 0)$, $\nabla f(x^0) = \text{mgh}(x^0, 1)$.

Dados $x, d \in \mathbb{R}^n$, o objetivo é minimizar a função $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$\varphi(t) = f(x + td).$$

Parâmetros

- $\varepsilon = 10^{-5}$
- $\rho = 1$
- limitante superior $b_{\max} = 10^8$, para o valor de b .

Rotina do Método da Seção Áurea

Dados de entrada: variável `fun` com o nome da função, $x \in \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n$

Fixados: $\varepsilon = 10^{-5}$, $\rho = 1$, $b_{\max} = 10^8$, $\theta_1 = (3 - \sqrt{5})/2$, $\theta_2 = 1 - \theta_1$

Fase 1: Obtenção do intervalo $[a, b]$

$a = 0$, $s = \rho$, $b = 2\rho$, $\text{phib} = \text{feval}(\text{fun}, x + bd, 0)$, $\text{phis} = \text{feval}(\text{fun}, x + sd, 0)$

REPITA enquanto $\text{phib} < \text{phis}$ e $2b < b_{\max}$

$a = s$, $s = b$, $b = 2b$, $\text{phis} = \text{phib}$, $\text{phib} = \text{feval}(\text{fun}, x + bd, 0)$

Fase 2: Obtenção de $t \in [a, b]$

$u = a + \theta_1(b - a)$, $v = a + \theta_2(b - a)$,

$\text{phiu} = \text{feval}(\text{fun}, x + ud, 0)$, $\text{phiv} = \text{feval}(\text{fun}, x + vd, 0)$

REPITA enquanto $(b - a) > \varepsilon$

SE $\text{phiu} < \text{phiv}$

$b = v$, $v = u$, $u = a + \theta_1(b - a)$,

$\text{phiv} = \text{phiu}$, $\text{phiu} = \text{feval}(\text{fun}, x + ud, 0)$

SENÃO

$a = u$, $u = v$, $v = a + \theta_2(b - a)$,

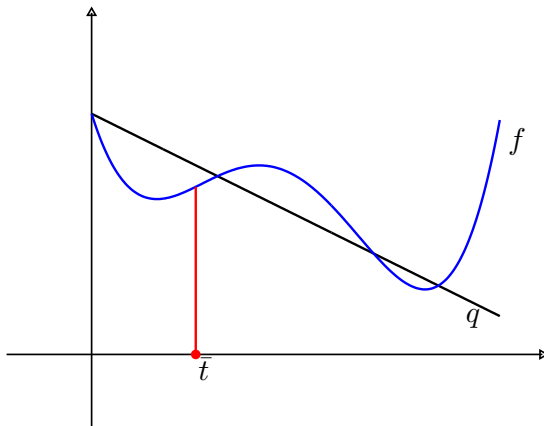
$\text{phiu} = \text{phiv}$, $\text{phiv} = \text{feval}(\text{fun}, x + vd, 0)$

$t = (u + v)/2$

Busca de Armijo

Considere $\eta \in (0, 1)$. Dados $x, d \in \mathbb{R}^n$, o objetivo da busca de Armijo é encontrar $\bar{t} > 0$ tal que

$$f(x + \bar{t}d) \leq f(x) + \eta \bar{t} \nabla f(x)^T d$$



Rotina da Busca de Armijo

Dados de entrada:

variável fun com o nome da função,

$$x \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}^n$$

Parâmetros: $\gamma = 0.7$, $\eta = 0.45$

$$t = 1$$

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0),$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1)$$

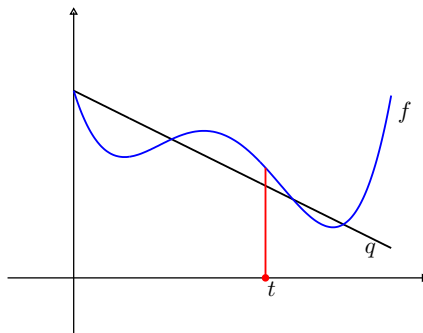
$$gd = g^T d$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$

REPITA enquanto $ft > f + \eta t gd$

$$t = \gamma t$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$



Rotina da Busca de Armijo

Dados de entrada:

variável fun com o nome da função,

$$x \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}^n$$

Parâmetros: $\gamma = 0.7$, $\eta = 0.45$

$$t = 1$$

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0),$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1)$$

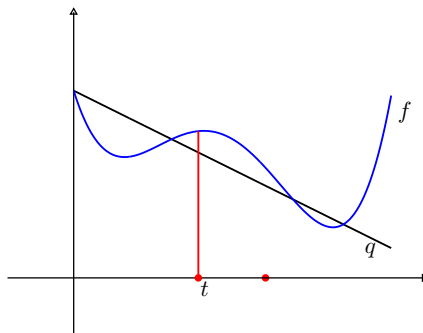
$$gd = g^T d$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$

REPITA enquanto $ft > f + \eta t gd$

$$t = \gamma t$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$



Rotina da Busca de Armijo

Dados de entrada:

variável fun com o nome da função,

$$x \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}^n$$

Parâmetros: $\gamma = 0.7$, $\eta = 0.45$

$$t = 1$$

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0),$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1)$$

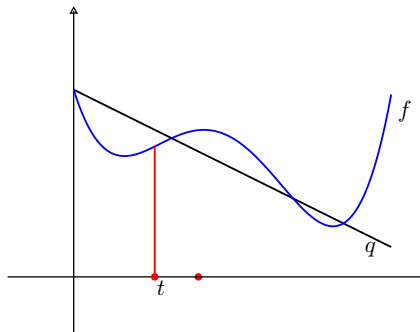
$$gd = g^T d$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$

REPITA enquanto $ft > f + \eta t gd$

$$t = \gamma t$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$



Rotina da Busca de Armijo

Dados de entrada:

variável fun com o nome da função,

$$x \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}^n$$

Parâmetros: $\gamma = 0.7$, $\eta = 0.45$

$$t = 1$$

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0),$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1)$$

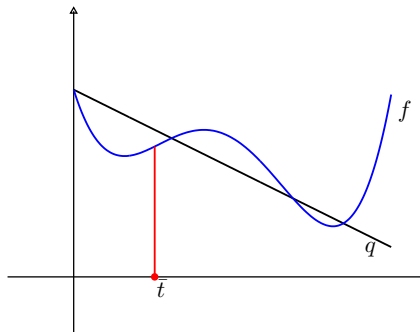
$$gd = g^T d$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$

REPITA enquanto $ft > f + \eta t gd$

$$t = \gamma t$$

$$ft = \text{feval}(\text{fun}, x + td, 0)$$



Busca unidirecional - Exemplo

Considere o problema de minimizar a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ao longo da direção $d = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Resolva este problema tanto pela busca exata quanto pela de Armijo.

Busca unidirecional - Exemplo

Considere o problema de minimizar a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ao longo da direção $d = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Resolva este problema tanto pela busca exata quanto pela de Armijo.

- Rotina da Seção Áurea fornece $t_1 = 5$ e

$$f(x + t_1 d) = 8 < 33 = f(x).$$

- Rotina de Armijo fornece $t_2 = 1$, significando que o passo inicial foi aceito. Além disso,

$$f(x + t_2 d) = 24 < 33 = f(x).$$

Em qualquer caso o valor da função decresceu, como era esperado.

Busca unidirecional - Exemplo

Considere o problema de minimizar a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ao longo da direção $d = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Resolva este problema tanto pela busca exata quanto pela de Armijo.

- Rotina da Seção Áurea fornece $t_1 = 5$ e

$$f(x + t_1 d) = 8 < 33 = f(x).$$

- Rotina de Armijo fornece $t_2 = 1$, significando que o passo inicial foi aceito. Além disso,

$$f(x + t_2 d) = 24 < 33 = f(x).$$

Em qualquer caso o valor da função decresceu, como era esperado.

Busca unidirecional - Exemplo

Considere o problema de minimizar a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ao longo da direção $d = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Resolva este problema tanto pela busca exata quanto pela de Armijo.

- Rotina da Seção Áurea fornece $t_1 = 5$ e

$$f(x + t_1 d) = 8 < 33 = f(x).$$

- Rotina de Armijo fornece $t_2 = 1$, significando que o passo inicial foi aceito. Além disso,

$$f(x + t_2 d) = 24 < 33 = f(x).$$

Em qualquer caso o valor da função decresceu, como era esperado.

Método do gradiente com seção áurea

$$k = 0, x = x^0$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1), \text{normg} = \|g\|$$

Para gerar os gráficos

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0), F = \{f\}, G = \{\text{normg}\}$$

IMPRIMA NA TELA: k, f, normg

REPITA enquanto $\text{normg} > \varepsilon$ e $k < k_{\max}$

Calcule t pela **busca exata a partir de x na direção $-g$**

$$x = x - tg$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1), \text{normg} = \|g\|$$

$$k = k + 1$$

Para gerar os gráficos

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0), F = F \cup \{f\}, G = G \cup \{\text{normg}\}$$

IMPRIMA NA TELA: k, f, normg

SE $k = k_{\max}$, MENSAGEM: Atingiu o número máximo de iterações!

$$K = \{0, 1, \dots, k\}$$

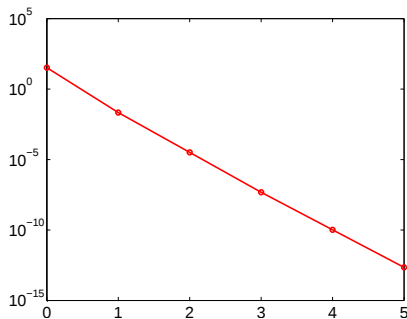
PLOTE OS GRÁFICOS: $K \times F$ e $K \times G$

Método do gradiente com seção áurea - Exemplo

Teste a rotina anterior para minimizar a função a função
 $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.
Considere os parâmetros $\varepsilon = 10^{-5}$ e $k_{\max} = 1000$.

O problema é resolvido em 5 iterações.

k	f	$\ g\ $
0	33.000000	29.732137
1	0.021607	0.160609
2	0.000032	0.029354
3	0.000000	0.000239
4	0.000000	0.000053
5	0.000000	0.000001



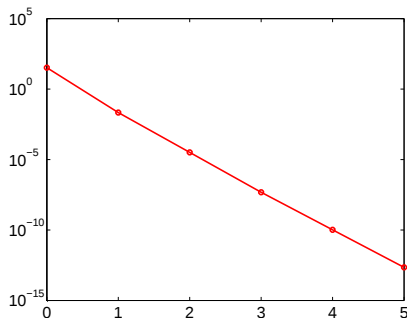
Variação de f

Método do gradiente com seção áurea - Exemplo

Teste a rotina anterior para minimizar a função a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.
Considere os parâmetros $\varepsilon = 10^{-5}$ e $k_{\max} = 1000$.

O problema é resolvido em 5 iterações.

k	f	$\ g\ $
0	33.000000	29.732137
1	0.021607	0.160609
2	0.000032	0.029354
3	0.000000	0.000239
4	0.000000	0.000053
5	0.000000	0.000001



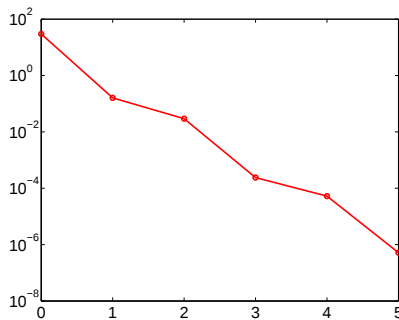
Variação de f

Método do gradiente com seção áurea - Exemplo

Teste a rotina anterior para minimizar a função $f(x) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 6x_2^2$ a partir do ponto $x^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$. Considere os parâmetros $\varepsilon = 10^{-5}$ e $k_{\max} = 1000$.

O problema é resolvido em 5 iterações.

k	f	$\ g\ $
0	33.000000	29.732137
1	0.021607	0.160609
2	0.000032	0.029354
3	0.000000	0.000239
4	0.000000	0.000053
5	0.000000	0.000001



Variação de $||\nabla f||$

Método do gradiente com busca de Armijo

$$k = 0, x = x^0$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1), \text{normg} = \|g\|$$

Para gerar os gráficos

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0), F = \{f\}, G = \{\text{normg}\}$$

IMPRIMA NA TELA: k, f, normg

REPITA enquanto $\text{normg} > \varepsilon$ e $k < k_{\max}$

Calcule t pela **busca de Armijo** a partir de x na direção $-g$

$$x = x - tg$$

$$g = \text{feval}(\text{fun}, x, 1), \text{normg} = \|g\|$$

$$k = k + 1$$

Para gerar os gráficos

$$f = \text{feval}(\text{fun}, x, 0), F = F \cup \{f\}, G = G \cup \{\text{normg}\}$$

IMPRIMA NA TELA: k, f, normg

SE $k = k_{\max}$, MENSAGEM: Atingiu o número máximo de iterações!

$$K = \{0, 1, \dots, k\}$$

PLOTE OS GRÁFICOS: $K \times F$ e $K \times G$

Rotina - resolve_problemas

Resolva os problemas da coleção Moré, Garbow e Hillstom pelo método do gradiente com busca exata, com $\varepsilon = 10^{-3}$ e $k_{\max} = 3000$. Calcule o percentual de problemas resolvidos sem atingir o número máximo de iterações.

Variáveis globais: FUNC e mm

Parâmetros: $\varepsilon = 10^{-3}$, $k_{\max} = 3000$

sucesso = 0, total = 0

PARA p = 1, 2, ...

 problemas_mgh (chamada do problema)

 grad_aurea (chamada do método)

 SE $k < k_{\max}$

 sucesso = sucesso + 1

 total = total + 1

Total de problemas: total

Problemas resolvidos: sucesso

Percentual de sucesso: sucesso/total

Comparar o desempenho de diferentes algoritmos

Objetivo: avaliar e comparar o desempenho de um conjunto $\mathcal{S}$ de n_s algoritmos aplicados a um conjunto $\mathcal{P}$ de n_p problemas teste.

Considere, por exemplo,

- $t_{p,s}$: tempo de CPU para resolver o problema $p \in \mathcal{P}$ pelo algoritmo $s \in \mathcal{S}$.
- Se o algoritmo s não resolveu o problema p , faça $t_{p,s} = \infty$.

Índice de desempenho

$$r_{p,s} = \frac{t_{p,s}}{\min \{t_{p,j} \mid j \in \mathcal{S}\}}.$$

Este índice vale 1 para o algoritmo mais eficiente.
Quanto maior for seu valor, pior será o desempenho do algoritmo.

Comparar o desempenho de diferentes algoritmos

Para cada algoritmo s consideramos a função de desempenho $\rho_s : [1, \infty) \rightarrow [0, 1]$ definida por

$$\rho_s(\tau) = \frac{1}{n_p} \text{card} \{p \in \mathcal{P} \mid r_{p,s} \leq \tau\}.$$

$\rho_s(1)$: proporção de problemas que o algoritmo s resolve no menor tempo.

Generalização: considere uma medida de desempenho arbitrária, $\rho_s(\tau)$ é a porcentagem de problemas que o algoritmo s resolve em τ vezes o valor da medida de desempenho do algoritmo mais eficiente.

Para facilitar a visualização, construímos um gráfico de perfil de desempenho, com as funções ρ_s , $s \in \mathcal{S}$.

Comparar o desempenho de diferentes algoritmos

- Variantes do método do gradiente com busca de Armijo, com $\varepsilon = 10^{-3}$, $k_{\max} = 3000$ e os seguintes parâmetros γ e η .
 - A1: $\gamma = 0.7$ e $\eta = 0.45$;
 - A2: $\gamma = 0.5$ e $\eta = 0.25$;
 - A3: $\gamma = 0.7$ e $\eta = 0.25$;
 - A4: $\gamma = 0.8$ e $\eta = 0.45$.
- Problemas: 25 primeiros da coleção Moré, Garbow e Hillstom.
- Armazene uma matriz $T \in \mathbb{R}^{25 \times 4}$ cuja p -ésima linha corresponde ao tempo gasto pelos algoritmos para resolver o problema p . Se o algoritmo s não resolveu o problema p , defina $T(p, s) = 10^8$.
- Implemente uma rotina que forneça o gráfico de perfil de desempenho dos 4 algoritmos.

Rotina para resolução dos problemas pelas variantes do algoritmo

Variáveis globais: FUNC e mm

Parâmetros: $\varepsilon = 10^{-3}$, $k_{\max} = 3000$

$T = 0$

PARA $p = 1, \dots, 25$

 problemas_mgh (chamada do problema p - Rotina problemas_mgh)

 PARA $s = 1, \dots, 4$

 Escolha γ e η (da variante do Algoritmo s)

 grad_armijo

$T(p, s) = \text{tp}$ (tempo gasto para resolver o problema)

Rotina para gerar o gráfico de perfil de desempenho

Dados: $T \in \mathbb{R}^{25 \times 4}$, $\tau_{\max}$

REPITA para $p = 1, \dots, 25$

$$T_{\min}(p) = \min \{T(p, s) \mid s = 1, \dots, 4\}$$

REPITA para $s = 1, \dots, 4$

$$r(p, s) = \frac{T(p, s)}{T_{\min}(p)}$$

REPITA para $s = 1, \dots, 4$

REPITA para $1 \leq \tau \leq \tau_{\max}$

$$\rho_s(\tau) = \frac{1}{n_p} \text{card} \{p \in \mathcal{P} \mid r_{p,s} \leq \tau\}$$

PLOTE O GRÁFICO: $\tau \times \rho_s(\tau)$

Gráfico de perfil de desempenho - Tempo computacional

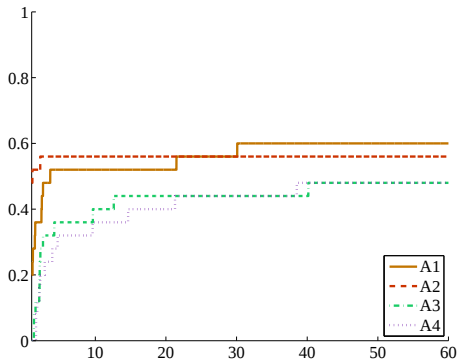
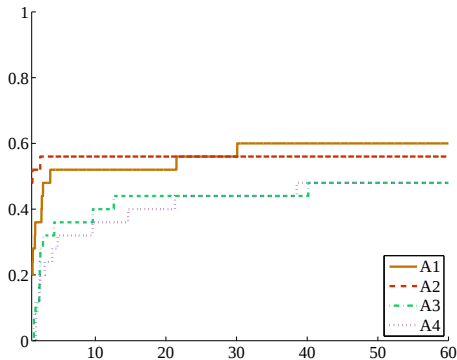


Gráfico de perfil de desempenho - Tempo computacional



- A1 resolve 60% dos problemas e é mais rápido em 20% deles.
- A2 é o mais rápido em 48% dos problemas e resolve 56% deles.
- A3 resolve 48% dos problemas usando 40 vezes o melhor tempo.
- O pior desempenho foi do algoritmo A4.
- A não resolução de alguns problemas motiva o estudo de outros métodos.

Medidas de desempenho de algoritmos:

- tempo computacional gasto pelos algoritmos para resolver um conjunto de problemas
- número de iterações
- número de avaliações de função
- ou qualquer outra medida de desempenho de um conjunto de algoritmos, bastando armazenar a informação desejada na matriz T da Rotina `roda_metodos`.



E. D. Dolan e J. J. Moré,
Benchmarking Optimization Software with Performance Profiles,
Mathematical Programming, 91, 201–213, 2002.



J. J. Moré, B. S. Garbow e K. E. Hillstom,
Testing Unconstrained Optimization Software,
ACM Transactions on Mathematical Software, v. 7, N.1, 17-41, 1981,