Exercício 3: Otimização de Funções

Ernesto González, Cláudia Reis, Beatriz Araújo

Comparação da eficácia dos métodos do Número de Ouro, do Gradiente e de Newton na determinação de extremos de funções. Estudo do impacto de parâmetros destes métodos no seu desempenho. Impacto do "step"na convergência dos métodos e apresentação de técnicas para garanti-la.

I. Corpo preso a uma mola

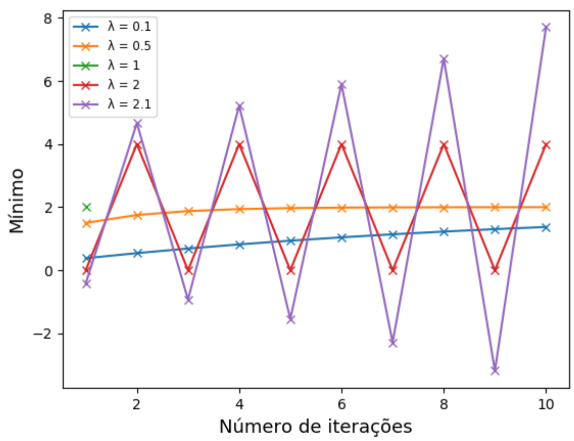

Figura 1. Gráfico dos valores mínimos da função $0.5 \cdot (x-2)^2$ em função do número de iterações pelo método do Gradiente para $x_0 = 0$ e $\lambda = 0.1$ (a azul), $\lambda = 0.5$ (a laranja), $\lambda = 1.0$ (a verde), $\lambda = 2.0$ (a vermelho) e $\lambda = 2.1$ (a roxo).

O primeiro exercício tem como objetivo encontrar a posição de equilíbrio de um corpo que está sujeito a um potencial dado pela função $0.5 \cdot (x-2)^2$. Para tal, implementámos dois métodos: o método do Número de Ouro ou método do Número Dourado e o método do Gradiente.

Primeiramente, implementou-se o método do Número de Ouro para os intervalos $a = [-0.7, 2.6]$ e $b = [0.4, 1.7]$, com um critério de convergência de $0,001\%$, e obteve-se, respetivamente, $x_0 = 2.000004079290686$ e $x_0 = 1.6999835871019766$. Tendo em conta que o valor da posição de equibíbrio é 2.0, conclui-se que o intervalo b afastou-se um pouco do resultado em comparação com o intervalo a, isto porque o intervalo b não contem o valor do potencial e, nesse caso, é dado o valor mais próximo possível dentro desse mesmo intervalo.

Posteriormente, foi implantado o método do Gradiente para a mesma função com os valores da constante $\lambda = [0.1; 0.5; 1.0; 2.0; 2.1]$, $x_0 = 0$, uma precisão de $1 \cdot 10^{-5}$ e um número máximo de iterações igual a 10.

Para cada iteração, o *Python* vai correr a expressão $x_{k+1} = x_k - \lambda f'(x_k)$ com $f'(x) = x - 2$ e, portanto, $f'(x_0) = -2$. Logo, $x_1 = -2\lambda$, $x_2 = 2\lambda - \lambda(2\lambda - 2)$ e assim sucessivamente até $x_{k+a} - x_k < 1 \cdot 10^{-5}$.

Observando a Figura 1, percebe-se que tanto $\lambda = 0.1$ (a azul) como $\lambda = 0.5$ (a laranja) convergem para $x = 2$ por valores à esquerda deste, uma vez que, como $\lambda < 1$, $\lambda f'(x_k)$ tende para 0^+ e x_{k+1} tende para 2^-. No entanto, como o número de iterações é limitado, para $\lambda = 0.1$ o método não consegue chegar ao valor pretendido usando apenas as 10 iterações, uma vez que o valor do λ é demasiado pequeno o que faz com que haja uma convergência lenta. Isto já não acontece para $\lambda = 0.5$ que chega ao valor pretendido. Para $\lambda = 1$ (a verde), tem-se que $x_1 = x_2 = 2$ e, por isso, apresentar apenas esses dois pontos (x_1 corresponde à interação 0). Para $\lambda = 2$ (a vermelho), $x_0 = 0$, $x_1 = 4$, $x_2 = 0$, e assim sucessivamente, pelo que, não havendo um limite de iterações, o método continuará infinitamente sempre entre 0 e 4. Para $\lambda = 2.1$ (a roxo) será algo semelhante, só que em vez de variar entre dois valores, irá estar sempre aumentar.

II. Distância em ligação iónica - uma variável

Estudou-se a função $U(r) = Ae^{-Br} - \frac{C}{r}$, que descreve o potencial de interação entre um ião Na^+ e um ião Cl^-, com os valores de A=80eV, C=10eVÅ, B=2Å^{-1}, de forma a encontrar a sua posiçao de equilíbrio, isto é, o ponto no qual o potencial é mínimo.

Com recurso ao Mathematica, representou-se graficamente a função $U(r)$ e calculou-se o seu mínimo usando a função FindMinimum (Fig. 2). Implementou-se também o método do Gradiente, em Python, com o valor inicial de $x_0 = 1$ para $\lambda = 0.1$ e $\lambda = 0.2$. Obteve-se $r = 2.153299961768564$ com o FindMinimum, e $r = 2.153321630545443$ com o método do Gradiente ($\lambda = 0.1$), o que indica que o último foi muito eficaz no apuramento do mínimo da função.

Implementou-se ainda o método de Newton para resolver o mesmo exercício. Este método é usado para determinar as raízes de uma função diferenciável. Neste caso, procura-se o mínimo da função U que corresponderá a um ponto estacionário, isto é, um ponto no qual a derivada se anula. Portanto, aplicou-se este método à derivada da função, de forma a determinar as raízes de $U'(r)$. Obteve-se um mínimo em $r = 2.1532923548433183$, valor muito próximo dos obtidos pelos dois métodos anteriores.

Comparou-se os métodos do Gradiente e de Newton (Figura 3). A diferença entre a eficácia dos métodos é notável, com o método de Newton a convergir mais rapidamente (apenas 6 iterações).

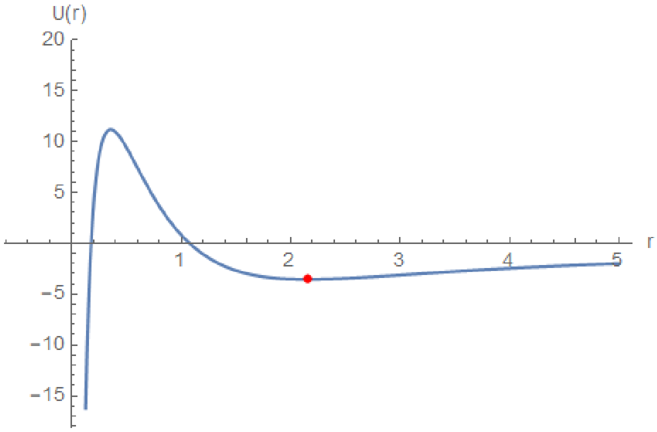

Figura 2. Potencial de interação (U) em função da distância entre os iões (r), para $r \in [0, 5]$. A vermelho está representado o mínimo da função, calculado com o FindMinimum (Mathematica), com o valor 2.153299961768564.

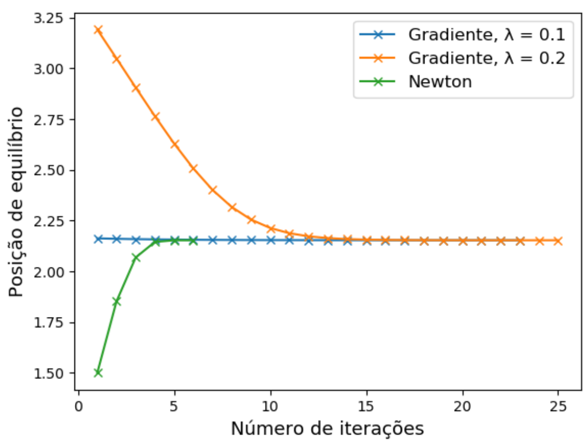

Figura 3. Posição de equilíbrio em função do número de iterações para o método do Gradiente, com $\lambda = 0.1$ (23 iterações) e $\lambda = 0.2$ (25 iterações), e para o método de Newton (6 iterações). Ambos com $x_0 = 1$.

III. Distância em ligação iónica - duas variáveis

Consideremos agora $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Da definição de $U(r)$, vem $U(x, y) = 80e^{-2\sqrt{x^2+y^2}} - \frac{10}{\sqrt{x^2+y^2}}$. Encontra-se apresentado na Figura 2 o resultado da aplicação do método do gradiente 2D em $U(x, y)$ para $x_0 = 5$ e $y_0 = -5$. O mínimo encontrado pelo método do gradiente 2D, usando $\lambda = 0.5$, é $(x, y) = (1.5226076382039215, -1.5226076382039215)$. É consistente com o mínimo $(x, y) = (1.52261, -1.52261)$ encontrado por FindMinimum do Mathematica. Tendo em conta que $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, para o mínimo encontrado pelo gradiente 2D temos $r = \sqrt{(1.5226076382039215)^2 + (-1.5226076382039215)^2} = 2.153292372$, que é o mínimo encontrado para $U(r)$ usando o método do gradiente 1D na secção anterior, com um erro de 10^{-7}. Outro aspecto interessante é como a trajetória seguida pelo método para chegar ao mínimo é $y = -x$. Isto deve-se à escolha do ponto de partida (x_0, y_0), que no nosso caso respeita $y = -x$. Sendo que o gradiente segue uma trajetória radial na circunferência com centro em $(x, y) = (0, 0)$ - como é de esperar pelas curvas de nível de circulares visíveis na Figura 5 - a trajetória seguida pelo método vai respeitar $y = \frac{y_0}{x_0}x$. A simetria das linhas de x por iteração e y por iteração em relação ao eixo das iterações deve-se também à simetria dos valores iniciais escolhidos.

Na Figura 5 vemos como o mínimo de $U(x, y)$ é em realidade uma circunferência de centro $(x, y) = (0, 0)$ e raio entre 1.5 e 3, estando de acordo com o mínimo encontrado na secção anterior.

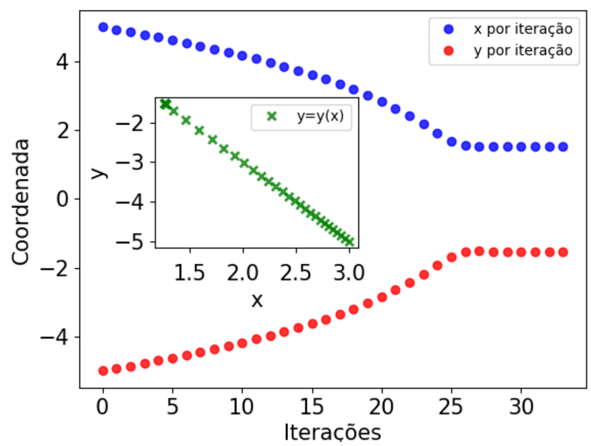

Figura 4. Resultados da aplicação do método do gradiente a $U(x, y) = 80e^{-2\sqrt{x^2+y^2}} - \frac{10}{\sqrt{x^2+y^2}}$ para $\lambda = 0.5$, partindo de $(x_0, y_0) = (5, -5)$. Os pontos azuis indicam o x encontrado em cada iteração e os vermelhos o y. A linha verde indica o y em função de x.

IV. Opcionais

A. Método da razão

O método do número de ouro é uma variação do método da razão, em que a razão usada é $r = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Na Figura 6 encontra-se o resultado da aplicação do método da razão para diferentes valores de r, aplicado para $[a, b] = [-0.7, 2.6]$.

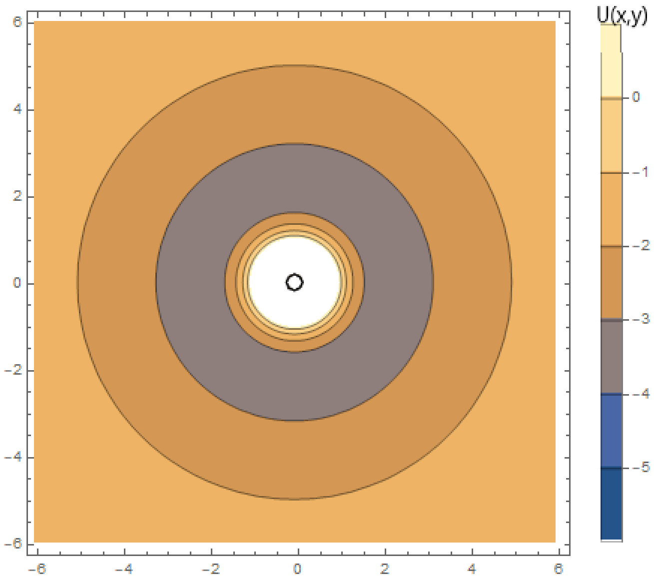

Figura 5. Contour plot de $U(x,y) = 80e^{-2\sqrt{x^2+y^2}} - \frac{10}{\sqrt{x^2+y^2}}$ com cada secção com potencial constante. A escala à direita indica o valor do potencial correspondente a cada cor.

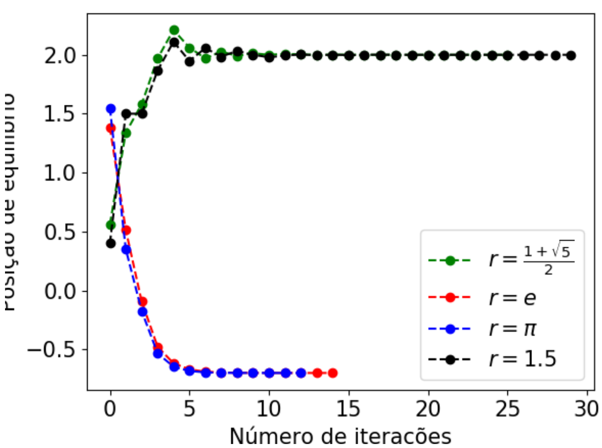

Figura 6. Gráfico dos valores mínimos da função $0.5(x-2)^2$ em função do número de iterações pelo método da razão aplicado em $[a,b] = [-0.7, 2.6]$ para diferentes valores de razão, r.

B. Optimização de λ no método do gradiente

Na secção I implementou-se o método do gradiente à função $0.5(x-2)^2$ para diferentes valores de λ (ver Figura 1). Mencionou-se a importância da escolha do λ na convergência do método. Consideremos agora o método do gradiente com optimização de λ, em que se fornece um λ inicial, λ_0, e com λ na n-ésima iteração dado por $\lambda_n = \frac{|(x_n - x_{n-1})(f'(x_n) - f'(x_{n-1}))|}{(f'(x_n) - f'(x_{n-1}))^2}$[1] - método do gradiente Barzilai-Borwein. Encontra-se na Figura 7 o resultado do método do gradiente simples para $\lambda = 2.1$ e o método Barzilai-Borwein para $\lambda_0 = 2.1$

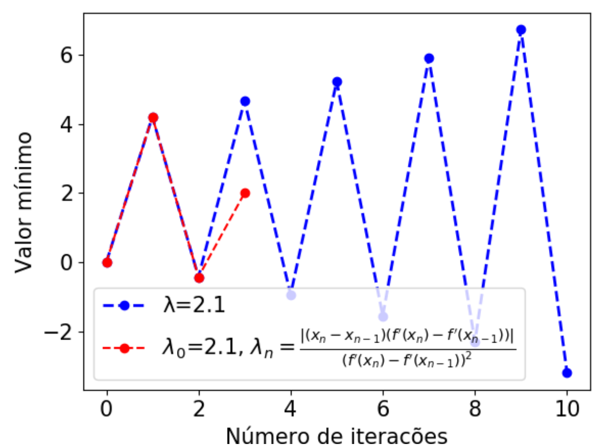

Figura 7. Gráfico dos valores mínimos da função $0.5(x-2)^2$ em função do número de iterações encontrados pelo método do gradiente para $x_0 = 0$ e $\lambda = 2.1$ (azul) e pelo método do gradiente Barzilai-Borwein para $x_0 = 0$ e $\lambda_0 = 2.1$ (vermelho).

Nas secções II e III consideramos o potencial de interação iónica em uma e duas dimensões. Considerando $U(x,y,z) = 80e^{-2\sqrt{x^2+y^2+z^2}} - \frac{10}{\sqrt{x^2+y^+z^2}}$ aplicamos o método do gradiente 3D com $(x_0, y_0, z_0) = (5, -5, 5)$ e obtivemos $(x, y, z) \approx (1.9031056, -0.783340, 0.783340)$. Fazendo $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ obtemos $r = 2.202057121870936$, assemelhando-se aos valores encontrados nos casos unidimensional e bidimensional.

[1] Barzilai, Jonathan; Borwein, Jonathan M. (1988).