# MÉTODOS COMPUTACIONAIS DE OTIMIZAÇÃO

2º Semestre de 2021 MT601

Profa.: Sandra Augusta Santos sasantos@unicamp.br

# Terceira Atividade

## – Métodos para minimização irrestrita suave –

Para entregar no dia 13/outubro

A **terceira lista de exercícios** será composta pelos 25 exercícios do Capítulo 5 da Referência Básica (Ribeiro & Karas)[1].

A **terceira atividade** ($A_3$) será constituída por duas partes. Para a **primeira parte** foram selecionados para entrega os 4 exercícios listados a seguir:

| Ribeiro & Karas | 5.3 | 5.7 | 5.11 | 5.14 |
|---|---|---|---|---|

A **segunda parte** consiste em um **conjunto de experimentos numéricos para minimização irrestrita**, baseado nas instruções para implementação computacional do Capítulo 6 de Ribeiro & Karas, e no roteiro a seguir:

1. Seguindo as instruções da seção 6.1, prepare um banco de problemas composto por *cinco funções-teste* do conjunto de Moré-Garbow-Hillstrom (MGH)[2], dentre o seguinte elenco: (1) Rosenbrock; (5) Beale; (6) Jenrich and Sampson; (9) Gaussian; (11) Wood; (16) Brown and Dennis; (18) Biggs EXP6; (23) Penalty I; (25) Variably dimensioned; (25) Trigonometric; (28) Discrete boundary value; (29) Discrete integral equation; (32) Linear function - full rank; (33) Linear function - rank 1.[3]

2. Utilizando a linguagem de sua preferência, programe a `Rotina 6.4` (seção áurea) e a `Rotina 6.5` (busca de Armijo).

3. Busca inexata com interpolação[4]. Na etapa de redução do tamanho do passo da busca inexata de Armijo, isto é, na escolha de $t_{\text{novo}} \in [0.1t, 0.9t]$, ao invés de simplesmente multiplicar o passo corrente por uma constante $\gamma$ pré-fixada entre 0 e 1, pode-se adotar uma estratégia baseada em interpolação polinomial. Com a notação $\phi(t) \equiv f(x^k + td^k)$, supondo que o passo inicial $t_{(0)}(=1)$ não foi aceito pela condição de Armijo, isto é, $\phi(t_{(0)}) > \phi(0) + \eta t_{(0)}\phi'(0)$, então $t_{(1)} \in (0, t_{(0)})$ é computado como minimizador do polinômio *quadrático* que interpola $\phi$ nas três informações disponíveis: $\phi(0)$, $\phi'(0)$ e $\phi(t_{(0)})$. Tal função quadrática é dada por

$$p_2(t) := \left(\frac{\phi(t_{(0)}) - \phi(0) - t_{(0)}\phi'(0)}{t_{(0)}^2}\right) t^2 + \phi'(0)t + \phi(0),$$

[1] *Otimização Contínua: Aspectos teóricos e computacionais*, São Paulo: Cengage Learning, 2013

[2] J. J. Moré, B. S. Garbow, K. E. Hillstrom, Testing unconstrained optimization software, *ACM Transactions on Mathematical Software*, 7(1):17-41, 1981. Disponível no *Google Classroom*.

[3] Para os problemas bidimensionais (i.e. com $n = 2$), explore a visualização das curvas de nível e dos pontos gerados. Para problemas com dimensão variável, trabalhe com escolhas para $n$ e/ou $m$ para os quais há alguma informação conhecida referente à solução no artigo MGH, ou então faça escolhas de modo que $\min\{n, m\} \geq 20$.

[4] Preparado com base na seção 3.4 do livro de J. Nocedal e S J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer: New York, 1999. (Seção 3.5 na 2ed.)

e seu minimizador é $t_{(1)} = \dfrac{-\phi'(0)t_{(0)}^2}{2[\phi(t_{(0)}) - \phi(0) - \phi'(0)t_{(0)}]}$. Verifique!

Se a condição de Armijo for satisfeita em $t_{(1)}$, a busca está concluída[5]. Caso contrário, construímos um polinômio *cúbico* interpolante para $\phi$, baseado nas quatro informações disponíveis: $\phi(0)$, $\phi'(0)$, $\phi(t_{(0)})$ e $\phi(t_{(1)})$. Esta função cúbica é dada por

$$p_3(t) := at^3 + bt^2 + t\phi'(0) + \phi(0),$$

em que $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \dfrac{1}{t_{(0)}^2 t_{(1)}^2 (t_{(1)} - t_{(0)})} \begin{bmatrix} t_{(0)}^2 & -t_{(1)}^2 \\ -t_{(0)}^3 & t_{(1)}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi(t_{(1)}) - \phi(0) - \phi'(0)t_{(1)} \\ \phi(t_{(0)}) - \phi(0) - \phi'(0)t_{(0)} \end{bmatrix}$.

Derivando $p_3(t)$, verifica-se que o minimizador $t_{(2)}$ de $p_3(t)$ pertence ao intervalo $[0, t_{(1)}]$ e é dado[6] por

$$t_{(2)} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 3a\phi'(0)}}{3a}.$$

Se necessário, esse procedimento é repetido, com um polinômio cúbico interpolante em $\phi(0)$, $\phi'(0)$ e nos dois valores mais recentes computados para $\phi$, até que um valor para $t$ satisfazendo Armijo seja obtido.

Com base nessas expressões, implemente uma rotina para a busca de Armijo com interpolação quadrática/cúbica.

4. Utilizando a `Rotina 6.6` como ponto de partida, implemente o método do Gradiente com um parâmetro de entrada que define a busca a ser utilizada: seção áurea, Armijo com *backtracking* simples e Armijo com *backtracking* via interpolação.

5. Planeje um conjunto de experimentos explorando comparativamente as três estratégias de busca unidimensional no **seu conjunto** de problemas-teste. Fixada uma estratégia, para investigar se, e de que maneira, o desempenho depende dos parâmetros algorítmicos envolvidos, trabalhe com outras possibilidades para as constantes, além das sugeridas no livro-texto. Por exemplo, para Armijo com *backtracking* simples, ao invés de usar $\gamma = 0.7$ e $\eta = 0.45$ (cf. `Rotina 6.5`), explore outras opções para *reduzir* o tamanho do passo (p.ex. $\gamma \in \{0.1, 0.5, 0.9\}$), bem como escolhas mais tolerantes ($\eta = 10^{-4}$), ou ainda mais restritivas ($\eta = 0.25$) para *aceitação* do passo.

6. Elabore um relatório descrevendo brevemente a metodologia adotada (para que o leitor, caso deseje, seja capaz de reproduzir os seus experimentos), os resultados obtidos e as suas conclusões. Os códigos das implementações desenvolvidas devem ser apresentados em um Apêndice, e também entregues (via *upload* em uma pasta compactada) acompanhando o texto do relatório. Além da correção usual, será feita uma avaliação comparativa, considerando aspectos qualitativos do relatório, como originalidade, qualidade da redação e profundidade da argumentação.

[5] É possível mostrar que $t_{(1)} < \frac{1}{2(1-\eta)}$. Como na prática a constante $\eta$ é escolhida bem pequena, isso indica que $t_{(1)}$ não é muito maior que $\frac{1}{2}$ (podendo inclusive ser menor) e nos dá uma ideia do novo tamanho de passo nesse caso (cf. Exercício 3.10 de Nocedal & Wright (3.13 na 2ed.)).

[6] Se $\phi(0) < \phi(t_{(1)})$, é possível mostrar que o minimizador satisfaz $t_{(2)} < \frac{2}{3}t_{(1)}$ (cf. Exercício 3.12 de Nocedal & Wright (3.15 na 2ed.)).