

Apostila de Instalação do CUTer

Abel Soares Siqueira - abel@ime.unicamp.br
Leandro F. Prudente - lfprudente@ime.unicamp.br

3 de novembro de 2012

Sumário

1	Instalação	1
2	Interface	4
2.1	Instalação da interface	5
3	Exemplos	5
3.1	Exemplos em Fortran	5
3.2	Exemplos em C	7

A biblioteca CUTer ([1, 2]) é de extrema importância para a realização de testes computacionais na área de otimização computacional. Tendo em vista que é necessário fazer comparações entre os algoritmos, Muitos deles atualmente têm uma interface que permite a execução dos testes do CUTer. Vamos mostrar nesse tutorial como instalar o CUTer e criar uma interface em Fortran, C e C++ para o mesmo. Algumas partes deste tutorial supõem que o leitor saiba o suficiente de linux.

1 Instalação

O CUTer é um ambiente de testes para métodos de otimização. Ele foi feito em Fortran, porém tem suporte a C/C++. Para instalar o CUTer você irá precisar dos programas:

- gawk
- gcc
- gfortran (ou outro compilador de fortran)
- svn (subversion)

Com os pacotes instalados, iremos criar uma pasta para o CUTer. Você pode criar uma pasta separada no sistema ou instalar tudo no seu diretório principal. No meu caso, irei criar uma

pasta chamada `libraries` na minha pasta pessoal, e criar uma pasta para o CUTer dentro dessa pasta. Ajuste os comandos de acordo com sua escolha.

```
$ mkdir -p $HOME/libraries/CUTer
$ cd $HOME/libraries/CUTer
```

Agora faça o download do SifDec2 pelo comando a seguir

```
$ svn co http://tracsvn.mathappl.polymtl.ca/SVN/cuter/sifdec/branches/SifDec2 ./sifdec2
```

E você precisa baixar o CUTer2 agora. Se quiser a versão 32 bits:

```
$ svn co http://tracsvn.mathappl.polymtl.ca/SVN/cuter/cuter/branches/CUTer2 ./cuter2
```

E a versão 64 bits:

```
$ svn co http://tracsvn.mathappl.polymtl.ca/SVN/cuter/cuter/branches/CUTer64 ./cuter2
```

Faça o download da coleção de problemas SIF na página

<http://cuter.rl.ac.uk/cuter-www/Problems/mastsif.shtml>

ou use os comandos

```
$ wget ftp://ftp.numerical.rl.ac.uk/pub/cuter/mastsif_small.tar.gz
$ wget ftp://ftp.numerical.rl.ac.uk/pub/cuter/mastsif_large.tar.gz
```

Descompacte os problemas pequenos com o comando

```
$ tar -zxvf mastsif_small.tar.gz
```

Se quiser, descompacte os problemas grandes também. Note que estes problemas são muito mais pesados que os pequenos, então aconselho baixá-los apenas se for necessário.

```
$ tar -zxvf mastsif_large.tar.gz
```

Iremos começar a instalar o CUTer. Para isso, vamos instalar o decodificador dos problemas SIF (que faz parte da biblioteca CUTer). Entre na pasta `sifdec2` criada em `$HOME/libraries/CUTer`.

```
$ cd $HOME/libraries/CUTer/sifdec2
```

Agora digite o comando

```
$ ./install_sifdec
```

A instalação do sifdec irá pedir que você escolha

- Plataforma (no nosso caso será 5 - PC)
- Sistema Operacional (no nosso caso será 2 - linux)
- Compilador Fortran (no nosso caso será 7 - GNU gfortran)
- Precisão (no nosso caso será D - double)

- Tamanho (no nosso caso será L - large, porém pode ser necessário mudar para C - custom, dependendo do software e dos testes que você utilizará. Nesse caso edite o arquivo na pasta `build/arch/size.custom` antes de continuar.)

O instalador vai lançar a mensagem

```
By default, SifDec with your selections will be installed in
/home/abel/libraries/CUTer/sifdec2/SifDec.large.pc.lnx.gfo
Is this OK (Y/n)?
```

Anote o nome do diretório que será criado e aperte enter. No nosso caso, será `SifDec.large.pc.lnx.gfo`. Para a próxima mensagem, escreva 'n' e aperte enter.

Agora vamos acrescentar as variáveis de sistema para que o instalador e os softwares que formos utilizar saibam onde está o CUTer. Edite o arquivo `$HOME/.bashrc` e adicione as seguintes linhas

```
ROOTCUTER="$HOME/libraries/CUTer"
export CUTER="$ROOTCUTER/cuter2"
export MYCUTER="$CUTER/CUTer.large.pc.lnx.gfo"
export SIFDEC="$ROOTCUTER/sifdec2"
export MYSIFDEC="$SIFDEC/SifDec.large.pc.lnx.gfo"
export MASTSIF="$ROOTCUTER/mastsif"
export MANPATH="$CUTER/common/man:$SIFDEC/common/man:$MANPATH"
export PATH="$MYCUTER/bin:$MYSIFDEC/bin:$PATH"
```

Se for necessário, mude a variável `ROOTCUTER`, e o diretório que eu mandei anotar. Note que já criamos um diretório para o CUTer, supondo que ele siga as mesmas opções que o SifDec. Para que essas mudanças façam efeito é necessário usar o comando

```
$ source $HOME/.bashrc
```

ou reiniciar o terminal. Agora entre na pasta que criamos anteriormente. Para isso basta fazer

```
$ cd $MYSIFDEC
```

Se deu algum erro, você pode ter errado o nome na definição da variável. Verifique que a pasta realmente existe e refaça os passos se necessário.

Agora rode o comando

```
$ ./install_mysifdec
```

Ao final desse comando, a frase

```
install_mysifdec : Do you want to 'make all' in
/home/abel/libraries/CUTer/sifdec2/SifDec.large.pc.lnx.gfo now (Y/n)?
```

aparecerá. Aperte enter. Agora vamos instalar o CUTer. Para isso, faça

```
$ cd $CUTER
$ ./install_cuter
```

A instalação do cuter irá pedir que você escolha

- Plataforma (no nosso caso será 5 - PC)
- Sistema Operacional (no nosso caso será 2 - linux)

- Compilador Fortran (no nosso caso será 7 - GNU gfortran)
- Compilador C (no nosso caso será 4 - g++)
- Precisão (no nosso caso será D - double)
- Tamanho (no nosso caso será L - large, com a mesma observação sobre o tamanho.)

Quando necessário, aperte enter para confirmar a continuação do programa. Se tudo deu certo, o CUTER deve estar instalado. Caso tenha acontecido algum erro, reveja as variáveis e volte os passos. Pode ser necessário apagar tudo que você baixou e baixar novamente (em último caso). Para verificar que realmente está tudo funcionando, faça

```
$ mkdir -p $HOME/libraries/CUTer/Testing
$ cd $HOME/libraries/CUTer/Testing
$ runcuter -p gen -D ROSENBR
```

Se nenhum erro aparecer, e aparecer várias informações do problema, então o CUTER foi instalado corretamente.

2 Interface

A biblioteca CUTER dá ao usuário um conjunto de funções para receber informações do problema. As funções são separadas para o caso irrestrito (precedidas pela letra *U*) ou restrito, (precedidas pela letra *C*). Se o usuário necessitar do valor da função objetivo num ponto dado, ele pode chamar UFN se o problema for irrestrito, ou CFN caso contrário. Note que a sintaxe das funções não é a mesma, pois o CUTER tenta ser o mais prático possível. A sintaxe dessas funções é

- UFN (*N*, *X*, *F*), onde *N* é um inteiro indicando o número de variáveis do problema, *X* é um vetor de reais, e *F* é real que sai com o valor da função objetivo.
- CFN (*N*, *M*, *X*, *F*, *LC*, *C*), onde *N*, *X* e *F* indicam as mesmas coisas, *M* é um inteiro indicando o número de restrições, *C* é um vetor de reais, com os valores das restrições e *LC* é a dimensão real de *C*, que deve ser maior ou igual a *M*.

Existem muitas outras funções para interação com o problema. Elas podem ser vistas na documentação do CUTER no arquivo `general.pdf` dentro da pasta `$CUTER/common/doc` nas páginas 31 e 32.

Para rodar nossa biblioteca com o CUTER, é necessário criar alguns arquivos extras. Um deles é o código que relaciona o nosso programa com essas funções do CUTER. Além disso, também é necessário criar um arquivo que indica ao CUTER quais as bibliotecas que nossa biblioteca precisa. A maneira tradicional de se trabalhar com o CUTER (o novo CUTER, pelo menos) é compilar nossa biblioteca inteira para um arquivo `.a`, compilar esse arquivo de ligação do CUTER com nossa biblioteca, e passar tudo isso pro CUTER. Quando necessário, rodamos o nosso pacote pelo comando do CUTER `runcuter`. Por exemplo, para rodar o pacote `pack_exemplo`, usamos o comandos

```
$ runcuter -p pack_exemplo -D problema
```

onde `problema` é um dos problemas do CUTER sem a extensão `.SIF`.

2.1 Instalação da interface

3 Exemplos

Como exemplos do CUTer, vamos criar bibliotecas em diversas linguagens para resolver o problema de minimização irrestrita. Vamos implementar o método de máxima descida com busca linear utilizando o critério de Armijo.

Considere o problema

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (3.1)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua e derivável. Vamos procurar um ponto estacionário para esse problema, isto é, um ponto $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\nabla f(x^*) = 0.$$

Obviamente, como vamos implementar este método, vamos parar quando encontrarmos um iterando x^k tal que $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$, onde $\varepsilon > 0$ é dado. O método está descrito a seguir.

1. Dados $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$, $\alpha \in (0, 1)$, $k = 0$.
2. Enquanto $\|\nabla f(x^k)\| > \varepsilon$ faça
 1. $d^k = -\nabla f(x^k)$
 2. $\lambda_k = 1$
 3. Enquanto $f(x^k + \lambda_k d^k) > f(x^k) + \alpha \lambda_k \nabla f(x^k)^T d^k$ faça
 1. $\lambda_k = \lambda_k / 2$
 4. $x^{k+1} = x^k + \lambda_k d^k$
 5. $k = k + 1$
3. $x^* = x^k$.

Vamos implementar este método em algumas linguagens, e às vezes, mais de uma vez, para exemplificar a interface CUTer.

3.1 Exemplos em Fortran

Fizemos uma implementação do método de máxima descida. Temos dois arquivos na implementação:

- **gradient.f**: Este arquivo contém a definição do método.
- **gradientmain.f**: Este arquivo contém a rotina principal do fortran.

Além desses arquivos também é necessário um arquivo com as definições das subrotinas

- **inip(n,x)**: Retorna n, a dimensão do problema, e x, o ponto inicial.
- **evalf(n,x,f)**: Recebe a dimensão do problema n, e o ponto x, e retorna o valor da função objetivo em f.
- **evalg(n,x,g)**: Recebe a dimensão do problema n, e o ponto x, e retorna o valor do gradiente da função objetivo em g.

- `endp(n,x)`: Imprime informações sobre a solução.

Para criar a interface em fortran, é necessário apenas criar um arquivo com as subrotinas acima. O arquivo com a interface (sem os comentários está abaixo:)

```

subroutine inip(n,x)

implicit none

integer n

double precision x(*)

integer i

integer err, ifile, nt, m, nmax
PARAMETER (nmax=10000)
double precision bl(nmax), bu(nmax)

ifile = 30
OPEN(ifile, FILE='OUTSDIF.d', FORM='FORMATTED',
$      STATUS='OLD', IOSTAT=err)
REWIND ifile
IF (err.NE.0) THEN
  WRITE(*,*) 'Could not open the OUTSDIF.d file'
  STOP
ENDIF

CALL cdimen(ifile, nt, m)

if (nt.GT.nmax) THEN
  WRITE(*,*) 'Increase nmax'
  STOP
ENDIF
if (m.GT.0) THEN
  WRITE(*,*) 'Cannot handle constraints'
  STOP
ENDIF

CALL usetup(ifile, 7, n, x, bl, bu, nmax)

DO i = 1,n
  IF ((bl(i).GT.-1.0D20).OR.(bu(i).LT.1.0D20)) THEN
    WRITE(*,*) 'Cannot handle boxes'
    STOP
  ENDIF
ENDDO

end

C *****
C *****

subroutine evalf(n,x,f)

implicit none

integer n
double precision f

double precision x(n)

```

```

CALL ufn(n, x, f)

end

C *****
C *****

subroutine evalg(n,x,g)

implicit none

integer n

double precision g(n),x(n)

CALL UGR(n, x, g)

end

C *****
C *****

subroutine endp(n,x)

implicit none

integer n
double precision x(n)
integer i

write(*,*)'Solution:'
do i = 1,n
    write(*,*)x(i)
end do

end

```

3.2 Exemplos em C

Fizemos três implementações do método de máxima descida. A primeira é uma implementação que não leva em conta o CUTer, e depois adapta o CUTer para o problema. A segunda já leva em conta o formato das funções do CUTer e faz pouca adaptação posteriormente. A terceira usa exatamente as funções do CUTer, não necessitando de adaptação.

Cada implementação do método de máxima descida consiste de dois arquivos: `steepest_descent.h` e `steepest_descent.c`. No `.h`, definimos que funções iremos chamar, e uma estrutura com as informações da execução. As funções para a primeira implementação são

- `double Norm (double * x, unsigned int n);`
Esta função calcula a norma 2 de um vetor `x` com tamanho `n`.
- `double NormSqr (double * x, unsigned int n);`
Esta função calcula o quadrado da norma 2 de um vetor `x` com tamanho `n`. É mais rápido que a função `Norm` pois não envolve raiz quadrada.
- `SteepestDescent (double * x, unsigned int n, Status * status);`
Esta é a função que encontra o ponto estacionário. `x` entra como ponto inicial e sai como

a solução. `n` é a dimensão do problema e `status` é um ponteiro para a estrutura de informações.

- `SD_Print (double * x, unsigned int n, Status * status);`
Esta função imprime o vetor `x` e as informações da execução do problema.

A estrutura do problema

```
typedef struct _Status {  
    unsigned int iter;  
    double f, ng;  
    unsigned int n_objfun, n_gradfun;  
} Status;
```

`iter` é o número de iterações que o algoritmo executou, `f` é o valor da função objetivo na solução, `ng` é a norma do gradiente da função objetivo, `n_objfun` é o número de cálculos da função objetivo e `n_gradfun` é o número de cálculos do gradiente. Mostraremos as diferenças das outras implementações posteriormente.

Nosso arquivo `.c` contém as definições das funções acima, e contém uma declaração de função usada para acessar a função objetivo e o gradiente. Na primeira implementação, essa declaração é

```
double objfun (double * x, unsigned int n);  
void gradfun (double * x, unsigned int n, double * g);
```

As funções `Norm`, `NormSqr` e `SD_print` são idênticas para todas as implementações e serão deixadas de fora. A implementação do método em si encontra-se abaixo.

```
void SteepestDescent (double * x, uint n, Status *status) {  
    double * g, f, fp;  
    double * xp, lambda, ng_sqr;  
    uint i;  
  
    if ( (x == 0) || (status == 0) )  
        return;  
  
    g = (double *) malloc(n * sizeof(double) );  
    xp = (double *) malloc(n * sizeof(double) );  
    status->iter = 0;  
    status->n_objfun = 0;  
    status->n_gradfun = 0;  
  
    f = objfun(x, n);  
    status->n_objfun++;  
    gradfun(x, n, g);  
    status->n_gradfun++;  
  
    status->ng = Norm(g, n);  
  
    while (status->ng > EPSILON) {  
        lambda = 1;  
  
        for (i = 0; i < n; i++) {  
            xp[i] = x[i] - g[i];  
        }  
  
        fp = objfun(xp, n);  
        status->n_objfun++;
```



```

ng_sqr = status->ng*status->ng;

while (fp > f - 0.5 * lambda * ng_sqr) {
    for (i = 0; i < n; i++) {
        xp[i] = x[i] - lambda*g[i];
    }
    lambda = lambda/2;
    fp = objfun(xp, n);
    status->n_objfun++;
}

for (i = 0; i < n; i++)
    x[i] = xp[i];

f = objfun(x, n);
status->n_objfun++;
gradfun(x, n, g);
status->n_gradfun++;
status->ng = Norm(g, n);
status->iter++;
}

status->f = f;

free(xp);
free(g);
}

```

Um código de exemplo para esse teste é

```

#include <stdio.h>
#include "steepest_descent.h"

/*
 * Each file testx.c is a different problem. The user will have to
 * implement his own file, defining objfun and gradfun.
 */

/*
 * This problem is
 *
 *  $\min f(x) = 0.5*(x_1^2 + x_2^2)$ 
 *
 * starting from point  $x_0 = (1,2)$ ;
 */

double objfun (double * x, unsigned int n) {
    (void)n;
    return 0.5 * (x[0]*x[0] + x[1]*x[1]);
}

void gradfun (double * x, unsigned int n, double * g) {
    unsigned int i;

    for (i = 0; i < n; i++)
        g[i] = x[i];
}

int main () {
    double x[2];
    Status status;

```

```

x[0] = 1;
x[1] = 2;

SteepestDescent(x, 2, &status);

SD_Print(x, 2, &status);

return 0;
}

```

Este código implementa o problema de minimizar $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$ em duas dimensões. Note como temos que declarar as funções `objfun` e `gradfun`. Sem elas teríamos erros na compilação. Veja os arquivos `test2.c` e `test3.c` para outros exemplos.

A interface para o CUTer é o arquivo `c_example1main.c`:

```

#include "cuter.h"
#include "CExample1/steepest_descent.h"

double objfun (double * x, unsigned int n) {
    double F = 0;
    int N = n;
    UFN(&N, x, &F);
    return F;
}

void gradfun (double * x, unsigned int n, double * g) {
    int N = n;
    UGR(&N, x, g);
}

int MAINENTRY () {
    double *x, *bl, *bu;
    char fname[10] = "OUTSDIF.d";
    int nvar = 0, ncon = 0, nmax;
    int funit = 42, ierr = 0, fout = 6;
    int i;
    Status status;

    FORTRAN_OPEN(&funit, fname, &ierr);
    CDIMEN(&funit, &nvar, &ncon);

    if (ncon > 0) {
        printf("ERROR: Problem is not unconstrained\n");
        return 1;
    }

    x = (double *) malloc (sizeof(double) * nvar);
    bl = (double *) malloc (sizeof(double) * nvar);
    bu = (double *) malloc (sizeof(double) * nvar);

    USETUP(&funit, &fout, &nvar, x, bl, bu, &nmax);

    for (i = 0; i < nvar; i++) {
        if ( (bl[i] > -CUTE_INF) || (bu[i] < CUTE_INF) ) {
            printf("ERROR: Problem has bounds\n");
            return 1;
        }
    }

    SteepestDescent(x, nvar, &status);
}

```

```

SD_Print(x, nvar, &status);

free(x);
free(bl);
free(bu);

return 0;
}

```

Note que também é necessário definir as funções `objfun` e `gradfun`. Essas funções, por sua vez, chamam as funções correspondentes em CUTer para esse serviço. A função `UFN` calcula o valor da função objetivo e a função `UGR` calcula o valor do gradiente. Note que quando compilamos uma função em Fortran, ele recebe um nome em letras minúsculas e com um `_` (underline) na frente (no caso do `gfortran`. Outros compiladores podem divergir). O arquivo `cuter.h` define macros para todas as funções do CUTer serem chamados com letras maiúsculas. Note ainda que a função `UFN` recebe um ponteiro para `int` e dois ponteiros para `double`, sendo o primeiro para o vetor x e o segundo para o valor da função objetivo. As funções do CUTer para C recebem ponteiros em todos os valores. Os valores que são vetores não precisam de um ponteiro adicional. Note também que como utilizamos `unsigned int` para os tamanhos, tivemos que converter os valores para `int`.

Veja agora o Exemplo 2. Nesse exemplo consideramos que as funções devem estar no mesmo formato que a função do CUTer.

```

void ufn (int * n, double * x, double * f);
void uofg (int * n, double * x, double * f, double * g, long int * grad);

```

O nome das funções foram escolhidas para seguir exatamente o formato do CUTer, mas aqui elas poderiam ser qualquer coisa. Note que a função `uofg` foi utilizada no lugar da função `ugr`. Essa função já calcula a função objetivo e o gradiente, sendo mais rápida que chamadas individuais. Com essa mudança, esse programa é levemente mais rápido que o outro. O resto do arquivo foi mudado de acordo a seguir essas mudanças.

A interface também teve uma mudança na definição das funções:

```

void ufn (int * n, double * x, double * f) {
    UFN(n, x, f);
}

void uofg (int * n, double * x, double * f, double * g, long int * grad) {
    UOFG(n, x, f, g, grad);
}

```

Essa interface fica muito mais natural de ser utilizada num problema com CUTer. Não precisamos converter nenhuma variável, simplesmente fazer a chamada da função com os parâmetros já dados. Note, no entanto, que estamos utilizando `long int` para as variáveis lógicas do CUTer. Essa é uma definição do arquivo `cuter.h`. Se mudarmos essa definição, então devemos criar uma variável `logical GRAD = *grad` e chamar a função com `UOFG(n, x, f, g, &GRAD)`.

A última interface já declara as funções que o CUTer irá definir. Então no arquivo `.c` temos

```

void ufn_ (int * n, double * x, double * f);
void uofg_ (int * n, double * x, double * f, double * g, long int * grad);

```

e no arquivo da interface não temos nenhuma definição de função. Lembre-se que o Fortran compilado com gfortran cria as funções com minúsculas e `_` na frente. Se mudarmos o compilador pode não funcionar. Além disso, a definição dessas funções é, na verdade

```
void UFN( integer *n, doublereal *x, doublereal *f );  
void UOFG( integer *n, doublereal *x, doublereal *f, doublereal *g,  
           logical *grad);
```

e esses tipos são definidos no arquivo `cuter.h`, podendo ser alterados pelo usuário. Se isso acontecer, é necessário mudar todo o programa.

Uma alternativa é utilizar `typedefs` para definir os tipos próprios, e deixar o acesso desses tipos para o usuário (assim como o arquivo `cuter.h`). Dessa maneira, se o usuário tiver necessidade de mudar o arquivo `cuter.h`, ele também pode (deve) mudar o arquivo com esses `typedefs`.

Para compilar a interface CUTER dos testes utilize

```
$ make cuter
```

Para rodar os testes utilize o comando

```
$ runcuter -p c_example# -D BARD
```

onde `#` é o número do exemplo e BARD é um dos problemas em que esse exemplo converge. Note que é preferível criar uma pasta separada para rodar os testes, já que eles geram lixo na pasta.

Referências

[1] <http://cuter.rl.ac.uk/cuter-www>

[2] <https://magi-trac-svn.mathappl.polymtl.ca/Trac/cuter>