Trabalho Computacional I

André Prado Procopio 2022055556 approcopio@ufmg.br Lucas Ribeiro da Silva 2022055564 lucasrsilvak@ufmg.br

I. Introdução

Os problemas de otimização não-linear podem ser problemas muito comuns nas áreas de engenharias e ciências exatas. Para lidar com esses problemas que visam, muitas vezes, encontrar soluções ótimas para problemas práticos, Foram criados ao longo do tempo diversos algoritmos para determinar tais soluções ótimas, cada um com suas peculiaridades e campos de excelência.

Este relatório implementa as 4 soluções para os problemas enunciados no Trabalho Computacional I da disciplina de Otimização Não-Linear, nele, serão disponibilizados os problemas, suas soluções, bem como os algoritmos utilizados e as justificativas para a inclusão de cada algoritmo e as respectivas informações sobre a metodologia e os resultados obtidos a partir do seus usos.

II. PROBLEMA 1

O problema 1 consiste na modelagem do controlador PID que estabilize a temperatura de um forno industrial na temperatura de referência T_{ref} , para isso, ele buscará ajustar o sinal de controle u(t) com base no erro entre a temperatura atual T(t) e a temperatura de referência. O controlador é definido com a equação abaixo.

$$u(t) = K_p e(t) + K_i \int_0^t e(\tau) d\tau + K_d \frac{d}{dt} e(t)$$

Da qual;

- $e(t) = T_{ref} T(t)$
- K_p , K_i e K_d são os ganhos proporcionais
- u(t) é o sinal de controle

Onde o objetivo é ajustar os valores K_p , K_i e K_d para minimizar o erro quadrático médio (MSE) ao longo de um período de tempo T_{sim} , descrito pela equação abaixo.

$$J(K_p, K_i, K_d) = \int_0^{T_{\text{sim}}} e(t)^2 dt$$

Definindo J como a função de custo a ser minimizada, o objetivo fica determinado como minimizar o erro quadrado médio de $J(K_p,K_i,K_d)$ e portanto, torna-se a equação abaixo.

$$\min_{K_p,K_i,K_d} \int_0^{T_{\text{sim}}} \left(T_{\text{ref}} - T(t,K_p,K_i,K_d)\right)^2 dt$$

Onde $T(t,K_p,K_i,K_d)$ é obtida a partir da solução de um modelo matemático simplificado e determinado por uma

equação diferencial ordinária.

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{T}{\tau} + \frac{K}{\tau}u(t)$$

E levando em consideração os parâmetros definidos pelo problema:

Parâmetro	Valor	
T_{ref}	100°C (temperatura de referência)	
T(0)	25°C (temperatura inicial)	
K_p	1 (ganho proporcional inicial)	
K_i	0,1 (ganho integral inicial)	
K_d	0,01 (ganho derivativo inicial)	
au	1 (constante de tempo do sistema)	
$T_{\rm sim}$	10 segundos (tempo de simulação)	
K	1 (constante de proporcionalidade)	

TABLE I

PARÂMETROS DO SISTEMA PARA CONTROLE PID

A. Implementação

O método escolhido para o Controlador PID foi o **Nelder-Mead Simplex** devido à dificuldade de diferenciação da função desejada há a necessidade de escolher um método que não faça uso de derivadas. O Nelder-Mead foi escolhido em relação aos demais métodos sem derivada pela sua alta adaptabilidade e também pela alta robustez do método, útil para lidar com as integrações numéricas. Neste caso, foi utilizado o método de Nelder-Mead da library *otimo.py* disponibilizada por meio de:

from otimo import NelderMeadSimplex

Para a implementação, foi utilizada o máximo de iterações de 10000, o máximo de avaliações de 5000 e uma precisão de 10^{-6} .

B. Resultados

Os resultados obtidos para o problema de otimização 1 foram:

Parâmetro	Valor
K_p	9.41
$\vec{K_i}$	13.20
K_d	0.00
MSE	5.52548×10^{-14}

TABLE II Parâmetros do controlador PID

E o gráfico obtido foi configurado para plotar 10000 pontos entre 0 e 10s por motivos de precisão.

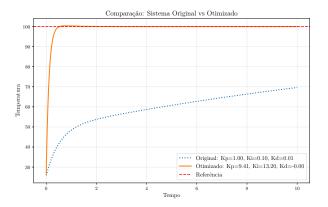


Fig. 1. Gráfico da T(t)

Os resultados indicam uma convergência veloz para 100°C a partir da temperatura inicial de 25°C, indicando um controlador com um ótimo amortecimento.

III. PROBLEMA 2

O problema 2 consiste na modelagem de um modelo de regressão logística de um classificador binário para estimar a probabilidade de um determinado evento qualquer ocorrer. Para isso, considera-se um conjunto de amostras $\{x_i\}_{i=0}^m$ onde cada amostra x_i é um vetor $x_i \in \mathbb{R}^n$ contendo n variáveis. Desta maneira, torna-se possível, a partir das amostras originais determinar uma classe binária para o problema tal que $y_i \in \{0,1\}$ de maneira que o conjunto de dados é formado por tuplas do tipo $(x_i, y_i)_{i=0}^m$. O modelo então deve calcular um vetor $w \in \mathbb{R}^n$ tal que o resultado de $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i}$ deve maximizar o número de acertos do classificador binário. Nesse caso, determinar o vetor w é um problema de otimização que pode ser solucionado utilizando uma equação de entropia cruzada:

$$J(\mathbf{w}) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[y_i \log \left(h(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \right) + (1 - y_i) \log \left(1 - h(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2} ||\mathbf{w}||^2$$

Da qual;

- $h(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i}}$ é a saída do modelo logístico m é o número de amostras
- λ é o parâmetro de regularização para evitar *overfitting*
- $\|\mathbf{w}\|^2$ é o termo de regularização L_2

Submetidos aos seguintes parâmetros definidos pelo problema: Portanto, a solução do problema fica determinada pela

Parâmetro	Descrição
\overline{m}	10000 (número de amostras)
n	500 (número de características)

TABLE III PARÂMETROS DO MODELO LOGÍSTICO

definição do vetor w que satisfaz a equação abaixo:

$$\min_{\mathbf{w}} J(\mathbf{w})$$

A. Implementação

O método escolhido foi o Gradiente Conjugado devido à alta dimensionalidade do problema de 500 variáveis (vetor w), o que tornaria métodos de cálculo de Hessiana, por exemplo, muito caros computacionalmente devido à memória. O Gradiente Conjugado é um método adequado pois funções convexas se comportam quadraticamente próximo ao mínimo. Neste caso, foi utilizado o CG do scipy por meio do:

Os dados do problema foram obtidos do arquivo questao2dados.npz disponibilizado e o vetor inicial w foi definido como nulo.

B. Resultados

Os resultados obtidos para o problema de otimização 2 foram:

Métrica	Valor
Custo final $J(\mathbf{w})$	0.0924
Número de iterações	5
Número de avaliações da função-objetivo	8517

TABLE IV RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO

O resultado indica uma boa configuração do vetor definido w para o problema de classificação binária dos dados fornecidos, com um custo final relativamente baixo.

IV. PROBLEMA 3

O problema 3 consiste no ajuste de parâmetros de uma campanha promocional com o objetivo de maximizar o lucro. Os parâmetros utilizados na modelagem são:

Parâmetro	Descrição
\overline{d}	Percentual de desconto aplicado na campanha
t	Tempo de duração da promoção
m	Orçamento destinado às ações de marketing

TABLE V PARÂMETROS DA CAMPANHA PROMOCIONAL

Onde o lucro da empresa L(d,t,m) é igual à receita R(d,t,m) menos os custos C(d,t,m) e a receita é dada por:

$$R(d, t, m) = V_B \cdot (1 + f_1(d) + f_2(t)) \cdot \log(1 + m)$$

Da qual;

- V_B é o número de vendas sem promoção.
- $f_1(d) = -0.005d^2 + 0.2d$ é o incremento percentual nas vendas devido ao desconto.
- $f_2(t) = 0.05t$ é o incremento nas vendas proporcional ao tempo da promoção.

Além disso, o custo é dado por:

$$C(d,t,m) = C_B + C_M(m) + P(d,t,m)$$

onde:

- C_B é o custo fixo inicial.
- $C_M(m) = m$ é o custo de marketing.
- P(d,t,m) é uma penalização não contínua:
 - Penalização de R\$5000 se d > 30% (desconto muito agressivo).
 - Penalização de R\$2000 se t > 15 dias.
 - Penalização de R\$1,000,000 se qualquer uma das seguintes restrições for violada:
 - * $0 \le d \le 50$ (o desconto não pode ser menor que 0% nem maior que 50%).
 - * $1 \le t \le 30$ (o tempo de duração da promoção não pode ser menor que 1 dia nem maior que 30 dias).
 - * $1000 \le m \le 50000$ (o orçamento de marketing não pode ser menor que R\$1000 nem maior que R\$50000).

E o problema geral de otimização pode ser definido como:

$$\max_{d,t,m} L(d,t,m) = R(d,t,m) - C(d,t,m)$$

Onde a solução deverá, além de implementar o algoritmo, contemplar os cálculos das receitas, custos, $f_1(d)$, $f_2(t)$ e P(d,t)

A. Implementação

O método escolhido foi o **Nelder-Mead Simplex** devido à descontinuidade da função de penalização P(d,t,m), o que torna o problema não-diferenciável e portanto, há a necessidade de escolher um método que não faça uso de derivadas. O Nelder-Mead foi escolhido em relação aos demais métodos sem derivada pela sua alta adaptabilidade. Neste caso, foi utilizado o método de Nelder-Mead do scipy por meio do:

Os valores de V_B e C_B foram definidos como 100000 e 10000, respectivamente. A precisão foi configurada para $10e^{-12}$ e o ponto inicial [d,t,m]=[10,10,10000] para a procura foi escolhido como:

B. Resultados

Os resultados obtidos para o problema de otimização 3:

Descrição	Valor
Iteração	278
Avaliações	511
Parâmetros ótimos - Desconto (d)	20.00%
Parâmetros ótimos - Tempo (t)	30.00 dias
Parâmetros ótimos - Orçamento (m)	\$49.949,02
Lucro máximo estimado L(d, t, m)	R\$4.806.501,13

TABLE VI RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO 3

Os resultados indicam uma proximidade muito grande com o valor orçamentário máximo sem punição de R\$1.000.000,00. Por testes experimentais ficou determinado inclusive que o valor de R\$50.000,00 tem uma função de lucro maior que o valor obtido, o que indica a presença de várias bacias de atração na função L(d,t,m). Isso é coerente com o algoritmo de Nelder-Mead que não garante otimalidade.

V. PROBLEMA 4

O problema 4 consiste na aleta unidimensional da figura abaixo: Onde o objetivo é determinar as temperaturas do

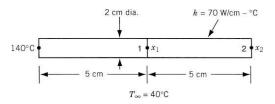


Fig. 2. Aleta unidimensional

regime permanente levando em consideração a minimização da função abaixo e tendo em consideração que x_1 e x_2 são as temperaturas na aleta nos pontos 1 e 2:

$$f(x_1, x_2) = 0.6382 x_1^2 + 0.3191 x_2^2 - 0.2809 x_1 x_2 - 67.906 x_1 - 14.29 x_2$$

A. Implementação

O método escolhido foi o **Newton** devido à forma quadrática da função $f(x_1, x_2)$, o que torna o problema solucionável em uma só iteração. Para isso, foram calculadas os vetores gradientes e a Hessiana da função original manualmente, como se segue:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.2764 \, x_1 - 0.2809 \, x_2 - 67.906 \\ 0.6382 \, x_2 - 0.2809 \, x_1 - 14.29 \end{bmatrix}$$

$$H(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.2764 & -0.2809 \\ -0.2809 & 0.6382 \end{bmatrix}$$

O ponto inicial foi definido como $(x_1, x_2) = (50, 30)$.

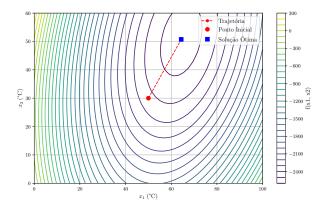
B. Resultados

Os resultados obtidos para o problema de otimização 4 foram:

Descrição	Valor
Solução ótima - x_1	64.3633°C
Solução ótima - x_2	50.7202°C
Valor ótimo $f(\mathbf{x}^*)$	-2547.7230

TABLE VII RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO 4

E o método de Newton teve a seguinte trajetória:



O resultado é coerente com a convergência em uma iteração esperada do método de Newton em um problema quadrático e soluciona o problema com valores factíveis de temperatura nos pontos avaliados.

VI. CONCLUSÃO

O trabalho permitiu trabalhar com problemas que simulam problemas reais em diversos contextos diferentes e permitiu a implementação e visualização dos algoritmos discutidos em sala de aula, permitindo a integração de conhecimentos adquiridos sobre cada método e suas peculiaridades, fornecendo uma base sólida para o estudo de algoritmos de otimização não-linear e oferecendo um trabalho computacional prático para lidar com a implementação dos métodos.

REFERENCES

[1] J. A. Ramírez, F. Campelo, F. G. Guimarães, L. S. Batista, and R. H. C. Takahashi, *Otimização Não Linear — Métodos Numéricos* para Otimização Irrestrita. Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Minas Gerais, 2023.