Problemas de Otimização - Solução pelo Método L-BFGS$_B$

Maria Marcolina Lima Cardoso

September 18, 2025

1 Problemas de Otimização Implementados

1.1 Problema 1: Penalty 1

Seja $x \in \mathbb{R}^n$. O problema é definido como:

$$f(x) = a \sum_{i=1}^{n} (x_i - 1)^2 + b \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 0.25 \right)^2 \tag{1}$$

com parâmetros $a = 1$ e $b = 10^{-3}$.

1.2 Problema 2: Trigonometric

Dado $x \in \mathbb{R}^n$, definimos o vetor $f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x))$ por:

$$f_i(x) = n - \sum_{j=1}^{n} \cos(x_j) + (i+1)(1 - \cos(x_i)) - \sin(x_i) \tag{2}$$

O objetivo é minimizar a norma quadrática:

$$F(x) = \|f(x)\|^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i(x)^2 \tag{3}$$

1.3 Problema 3: Extended Rosenbrock

Definido para $x \in \mathbb{R}^n$, com n par. O resíduo é dado por pares:

$$r_{2k-1} = 10(x_{2k} - x_{2k-1}^2) \tag{4}$$

$$r_{2k} = 1 - x_{2k-1}, \quad k = 1, \dots, n/2 \tag{5}$$

A função objetivo é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n} r_i(x)^2 \tag{6}$$

1.4 Problema 4: Extended Powell

Seja $x \in \mathbb{R}^n$, com n múltiplo de 4. Os resíduos são definidos em blocos:

$$r_{4i-3} = x_{4i-3} + 10x_{4i-2} \tag{7}$$

$$r_{4i-2} = \sqrt{5}(x_{4i-1} - x_{4i}) \tag{8}$$

$$r_{4i-1} = (x_{4i-2} - 2x_{4i-1})^2 \tag{9}$$

$$r_{4i} = \sqrt{10}(x_{4i-3} - x_{4i})^2 \tag{10}$$

A função objetivo é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n} r_i(x)^2 \tag{11}$$

1.5 Problema 6: QOR

Seja $x \in \mathbb{R}^{50}$. O problema é definido como:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{50} a_i x_i^2 + \sum_{i=1}^{33} B_i \left(d_i - \sum_{j \in A(i)} x_j + \sum_{j \in B(i)} x_j \right)^2 \tag{12}$$

com coeficientes a, B, d e conjuntos de índices $A(i), B(i)$.

1.6 Problema 7: GOR

Definimos $c_i(x_i)$ e $b_i(y_i)$ como:

$$c_i(x_i) = \begin{cases} a_i x_i \ln(1 + x_i), & x_i \geq 0 \\ -a_i x_i \ln(1 - x_i), & x_i < 0 \end{cases} \tag{13}$$

$$b_i(y_i) = \begin{cases} B_i y_i^2 \ln(1 + y_i), & y_i \geq 0 \\ B_i y_i^2, & y_i < 0 \end{cases} \tag{14}$$

O problema é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{50} c_i(x_i) + \sum_{i=1}^{33} b_i \left(d_i - \sum_{j \in A(i)} x_j + \sum_{j \in B(i)} x_j \right) \tag{15}$$

1.7 Problema 8: PSP

Definimos:

$$h(y) = \begin{cases} \frac{1}{y}, & y \geq 0.1 \\ 100(0.1 - y) + 10, & y < 0.1 \end{cases} \tag{16}$$

O problema é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{50} a_i (x_i - 5)^2 + \sum_{i=1}^{33} B_i \, h \left(d_i - \sum_{j \in A(i)} x_j + \sum_{j \in B(i)} x_j \right) \tag{17}$$

1.8 Problema 9: Tridia (Shanno's TRIDIA)

Para $x \in \mathbb{R}^n$, a função objetivo é:

$$F(x) = (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{n} (2x_i - x_{i-1})^2 \tag{18}$$

Características:

- Ponto inicial: $x_0 = (1, 1, \ldots, 1)^T$
- Mínimo: $F(x^*) = 0$
- Estrutura tridiagonal implícita na forma dos termos quadráticos encadeados

1.9 Problema 10: Engval1

Para $x \in \mathbb{R}^n$, a função objetivo é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \left[(x_i^2 + x_{i+1}^2)^2 - 4x_i + 3 \right] \tag{19}$$

Características:

- Ponto inicial: $x_0 = (2, 2, \ldots, 2)^T$
- Mínimo: $F(x^*) = 0$
- Estrutura de pares consecutivos de variáveis

1.10 Problema 11: Freuroth (Extended Freudentstein and Roth)

Para $x \in \mathbb{R}^n$, a função objetivo é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \left[r_1^2 + r_2^2 \right] \tag{20}$$

onde:

$$r_1 = x_i - 13 + 5x_{i+1}^2 - x_{i+1}^3 - 2x_{i+1} \tag{21}$$

$$r_2 = x_i - 29 + x_{i+1}^3 + x_{i+1}^2 - 14x_{i+1} \tag{22}$$

Características:

- Ponto inicial: $x_0 = (-2, -2, \ldots, -2)^T$
- Mínimo: $F(x^*) = 0$
- Termos cúbicos e quadráticos em pares consecutivos

1.11 Problema 12: Lminsurf (Linear Minimum Surface)

Para $x \in \mathbb{R}^n$, onde $n = p^2$ (quadrado perfeito), a função objetivo é:

$$F(x) = \sum_{i=1}^{p-1} \sum_{j=1}^{p-1} \frac{\sqrt{1 + 0.5(p-1)^2 (a_{ij}^2 + b_{ij}^2)}}{(p-1)^2} \tag{23}$$

onde:

$$a_{ij} = x_{i,j} - x_{i+1,j+1} \tag{24}$$

$$b_{ij} = x_{i+1,j} - x_{i,j+1} \tag{25}$$

Características:

- Ponto inicial: configurado com condições de contorno fixas
- Mínimo: $F(x^*) = 9$
- Problema de superfície mínima com restrições de contorno
- Condições de contorno: bordas fixas com valores lineares

1.12 Problema 13: Matrix Square Root 1

$$b_i = \sin(i^2), \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{26}$$

$$B = \text{reshape}(b, m, m)^T \tag{27}$$

$$A = B \cdot B \tag{28}$$

$$X = \text{reshape}(x, m, m) \tag{29}$$

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} (A_{ij} - (X \cdot X)_{ij})^2 \tag{30}$$

onde $n = m^2$ e $m \geq 2$.

1.13 Problema 14: Matrix Square Root 2

$$b_i = \sin(i^2), \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{31}$$

$$b_{2m+1} = 0 \quad \text{(Case 1)} \tag{32}$$

$$B = \text{reshape}(b, m, m)^T \tag{33}$$

$$A = B \cdot B \tag{34}$$

$$X = \text{reshape}(x, m, m) \tag{35}$$

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} (A_{ij} - (X \cdot X)_{ij})^2 \tag{36}$$

onde $n = m^2$ e $m \geq 2$.

1.14 Problema 14: Sparce Matrix Square Root

$$b_i = \sin(i^2), \quad i = 1, 2, \ldots, 3m - 2 \tag{37}$$

$$B_{ij} = \begin{cases} b_k, & \text{se } |i - j| \leq 1 \text{ e } (i, j) \text{ está na estrutura tridiagonal} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{38}$$

$$A = B \cdot B \tag{39}$$

$$X_{ij} = \begin{cases} x_k, & \text{se } |i - j| \leq 1 \text{ e } (i, j) \text{ está na estrutura tridiagonal} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{40}$$

$$F(x) = \sum_{|i-j| \leq 2} (A_{ij} - (X \cdot X)_{ij})^2 \tag{41}$$

onde $n = 3m - 2$ e $m \geq 2$. A soma é tomada apenas sobre os elementos não-zero da estrutura tridiagonal expandida de A.

2 Referências

1. Toint, Ph.L. "Test problems for partially separable optimization and results for the routine PSPMIN", Report 83/4, Department of Mathematics, FUNDP (Namur, B), 1983.

2. More', J.J., Garbow, B.S., Hillstrom, K.E. "Testing Unconstrained Optimization Software", ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 7(1), pp. 17-41, 1981.

3. Griewank, A., Toint, Ph. "Partitioned variable metric updates for large structured optimization problems", Numerische Mathematik 39:429-448, 1982.

4. Buckley, A.R. "Test functions for unconstrained minimization", TR 1989CS-3, Mathematics, statistics and computing centre, Dalhousie University, Halifax (CDN), 1989.