

TRABALHO COMPUTACIONAL – 2017/1

Considere o seguinte problema de otimização¹:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^4} f = \sum_{i=1}^4 (A_i x_i^4 + (x_i - B_i)^2 + D_i x_i) + C_1 x_1 x_2 + C_2 x_1 x_3 + C_3 x_1 x_4 + C_4 x_2 x_3 + C_5 x_2 x_4 + C_6 x_3 x_4$$

O método do Newton é uma técnica clássica para encontrar um candidato a mínimo da função acima, cujo algoritmo clássico é dado por:

Dados: número máximo de iterações, $itmax$ e tolerância para parada do algoritmo, ε ;

- (1) Faça $k \rightarrow 0$ e escolha $x^k = (x_1^k, x_2^k, x_3^k, x_4^k)^T$;
- (2) Calcule o vetor gradiente da função f avaliado no ponto x^k : $\nabla f(x^k) = [\partial f(x^k)/\partial x_i]^T$. Se a norma euclidiana de $\nabla f(x^k) < \varepsilon$ pare, pois x^k é a solução encontrada pelo método; caso contrário, realize o Passo 3;
- (3) Calcule a direção de descida p^k obtida por $\nabla^2 f(x^k) p^k = -\nabla f(x^k)$, em que $\nabla^2 f(x^k)$ é a matriz hessiana avaliada no ponto x^k ;
- (4) Faça $\alpha^k = 1$. Verifique se $f(x^k + \alpha^k p^k) \leq f(x^k) + 10^{-4} \alpha^k \nabla f(x^k)^T p^k$. Se sim, $x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k$; caso contrário, calcule um novo valor de α^k usando:

$$\alpha^k = - \frac{\nabla f(x^k)^T p^k}{2 [f(x^k + p^k) - f(x^k) - \nabla f(x^k)^T p^k]}.$$

- (5) Atualize os valores de x^k fazendo $x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k$;
- (6) Faça $k \rightarrow k+1$. Se $k > itmax$, pare. Caso contrário, retorne ao Passo (2).

Com base nos aspectos supracitados, faça uma implementação computacional do algoritmo do Newton para obter a solução do problema de otimização acima. As seguintes condições devem ser respeitadas:

- (i) Faça $\varepsilon = 1 \times 10^{-8}$, $itmax = 100$ e solução inicial $x^k = [0 \ 0 \ 0 \ 1]^T$;
- (ii) Conforme pode ser visto no algoritmo acima, em cada iteração do método é necessário resolver no passo 4 um sistema linear. Resolva esse sistema por meio de três diferentes métodos: Eliminação gaussiana, fatoração Choleski e o método do gradiente conjugado. Portanto, o problema deve ser resolvido três vezes, sendo que cada caso uma técnica de resolução de sistemas lineares deve ser aplicada até a convergência do algoritmo de Newton.

Elabore um relatório que apresente seguintes requisitos:

- (a) Os gráficos com os valores de $f(x^k)$, $\nabla f(x^k)$ e α^k ao longo das iterações;
- (b) Tempo total de cada execução;
- (c) Valor ótimo de x^k e o número de iterações de fornecido pelo método do Newton;
- (d) Execute o algoritmo para outro ponto inicial. Apresente os itens (a)-(c) acima.

Observações: O trabalho é individual e o relatório deve ser entregue por e-mail até 16/6/2017. O nome do arquivo deve ser **TURMA_ALUNO.pdf**. Não serão aceitos trabalhos após este prazo. O relatório deve ser limitado em 10 páginas. A implementação computacional vai ser apresentada para o professor para verificação da execução do algoritmo e questionamentos sobre elaboração e interpretação de resultados.

¹ $A = [0.7 \ 6 \ 0.001 \ 8]$, $B = [1 \ 5 \ -0.25 \ -3]$, $C = [1 \ 0.25 \ 0.40 \ 0.05 \ 0.1 \ 1]$; $D = [-3 \ 2 \ 0.5 \ -1]$.

² A hessiana de uma função f de n variáveis é uma matriz quadrada de ordem n que contém as derivadas parciais de segunda ordem da função.