PMR5215 – Otimização Aplicada ao Projeto de Sistemas Mecânicos
5ª Lista de Exercícios
Otimização Numérica sem Restrições

Grupos de 2 alunos
Entrega: 8/05/2023

1 Múltiplos Mínimos e Pontos de Partida

Dado o problema de otimização sem restrição:

$$\underset{x_1,x_2}{\text{Min}}\, F\left(x_1,x_2\right)=8{x_1}^4+5{x_2}^4+2{x_2}^2-36{x_1}^2$$

a) Plote a função (use a representação que achar melhor).

b) Calcule simbolicamente o vetor gradiente da função.

c) Utilizando um pacote numérico, resolva o problema com os pontos de partida $\mathbf{x}_0=\{1,0\}^T$ e $\mathbf{x}_0=\{-1,0\}^T$. Utilize um método de 1ª ordem, fornecendo ao método o gradiente do item b.

   Exemplos de pacotes numéricos e métodos de otimização de 1ª ordem:

   - Pacote SciPy para Python com a função `scipy.optimize.minimize`. Você deve fornecer o gradiente usando o parâmetro `flac`, que deve ser uma função que retorna um objeto do tipo `numpy.array`. Use o método `'CG'`.
   - Matlab® com o método `fminunc`. Note que você deve especificar uma função que retorna *dois* valores. O primeiro é o valor da função objetivo e o segundo é o seu gradiente. Especifique nas opções de otimização `'Algorithm'` como `'trust-region'` e `'SpecifyObjectiveGradient'` como `true`.
   - Scilab com o método `optim`. Use o algoritmo `'gc'`. Assim como com o Matlab®, sua função também deve retornar o gradiente.
   - Mathematica, com o método `FindMinimum`. Especifique o gradiente com a opção `Gradient`.

d) Quantos pontos de mínimo *distintos* foram obtidos no item b)? Calcule a Hessiana da Função. A função é Convexa em todo o domínio? E quanto às regiões $x_1 \leq 1$ e $x_1 \geq 1$? Comente.

2 Método dos gradientes conjugados de ordem 0 (*Powell*)

Considere a função:

$$F(x, y) = 17x^2 - 30xy - 128x + 17y^2 \tag{1}$$

a) Plote as curvas de nível da função.

b) Calcule analiticamente o gradiente da função e sua Hessiana. Ache o ponto estacionário e mostre que este ponto é um ponto de mínimo.

c) Otimização pelo método "*Steepest Descent*":

   Este é um método de busca no qual a direção s adotada para a busca é o vetor $-g$, gradiente da função no ponto explorado (ou seja, $s_x = -\mathrm{d}F/\mathrm{d}x$ e $s_y = -\mathrm{d}F/\mathrm{d}y$.)

   Calcule 6 iterações do método "*Steepest Descent*" tomando como ponto inicial o ponto $x = 0$, $y = 0$. Para tanto, preencha o Quadro 1 com os resultados do seu algoritmo.

Quadro 1: Resultados do método "*Steepest Descent*"

Iter.	x	y	$F(x, y)$	$\mathrm{d}F/\mathrm{d}x$	$\mathrm{d}F/\mathrm{d}y$	s_x	s_y	α
0	0	0						
1								
2								
3								
4								
5								
6								

No Quadro 1, o valor α é o mínimo da função $\Psi(\alpha) = F(x + s_x\alpha, y + s_y\alpha)$.

Sugestão: Naturalmente, pode-se usar qualquer método de busca em linha adequado. Note no entanto que para esta função em particular, se α é ponto estacionário de $\Psi(\alpha)$ então,

$$\alpha = \frac{s_x(-17x + 15y + 64) + s_y(15x - 17y)}{-30 s_x s_y + 17 s_x^2 + 17 s_y^2}$$

d) Repita a plotagem do item a) com os 7 pontos obtidos no item c)

e) Otimização pelo método dos gradientes conjugados de Powel Este método constrói direções H-conjugadas (onde H é a matriz Hessiana da função objetivo). Para tanto ele parte de um conjunto inicial de direções linearmente independente. O algoritmo tem dois níveis de iterações, descritos pelo índice i (externo) e j (interno). O índice j varia de 0 a n, onde n é a dimensão do problema. Para j de 0 a $n-1$ o algoritmo explora o conjunto atual de direções. Em j = n o algoritmo faz uma busca na direção definida pela diferença entre o último ponto explorado e o ponto inicial da iteração externa atual.

O algoritmo é:

$$s_{i,j} = \begin{cases} s_{i-1,j+1} & \text{para}\, j < n, i > 0 \\ x_{i,j} - x_{i,0} & \text{para}\, j = n \end{cases}$$

$$\alpha_{i,j} = \arg\min_{\alpha} F(x_{i,j} + \alpha s_{i,j})$$

$$x_{i,j} = \begin{cases} x_{i,j-1} + \alpha_{i,j-1} s_{i,j-1}, & \text{para}\, j > 0, i >= 0 \\ x_{i-1,n} + \alpha_{i-1,n} s_{i-1,n} & \text{para}\, j = 0, i > 0 \end{cases}$$

Note que este algoritmo precisa dos valores de x_0 e do conjunto inicial de direções $s_{0,0}, s_{0,1}, \ldots, s_{0,n-1}$.

Preencha o Quadro 2 com 2 iterações *externas* deste algoritmo.

Quadro 2: Resultados do método de Gradientes Conjugados

i	j	x	y	$F(x,y)$	s_x	s_y	α
0	0	0	0		1	0	
0	1				0	1	
0	2						
1	0						
1	1						
1	2						
2	0						

f) Repita a plotagem do item (a) com os 7 pontos (x, y) obtidos no item e).

g) Calcule o escalar $s_{0,2}^T H s_{1,2}$ onde H é a matriz Hessiana de F, $s_{0,2}$ é a direção seguida ao final da primeira iteração externa e $s_{1,2}$ é a direção seguida ao final da segunda iteração externa.